Jaap Molenaar
Faculteit Wiskunde en Informatica
Technische Universiteit Eindhoven
Postbus 513, 5600 MB Eindhoven
j.molenaar1@tue.nl

Inaugurele rede

Waarom werkt wiskunde

Jaap Molenaar, werkzaam bij de groep Toegepaste Analyse van de TU Eindhoven, aanvaardde op 31 mei 2001 het ambt van hoogleraar in de Toegepaste Analyse en Mathematische Fysica aan de Faculteit Toegepaste Wiskunde van de Universiteit Twente. De rede die hij daarbij uitsprak gaat over het modelleren van planeetbanen, schouders van vulmachines en gedrag van polymeren.

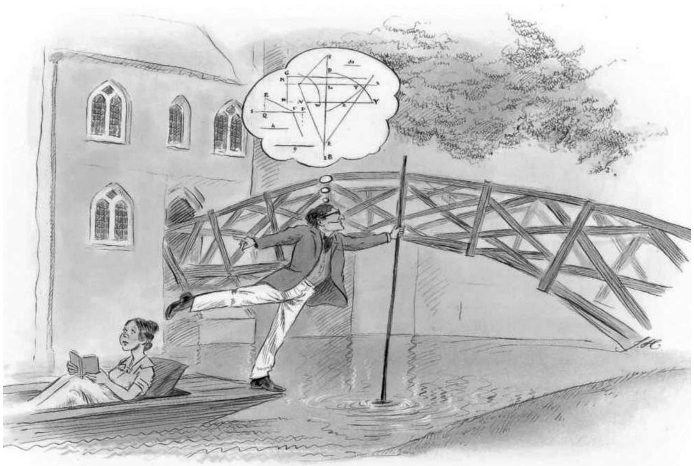
Vorig jaar liep ik voor het eerst van mijn leven rond in Cambridge, dat voorname en vermaarde centrum van wetenschap in het Verenigd Koninkrijk. Ergens in het centrum, bij het riviertje de Cam dat de stad doorsnijdt en waar studenten in een soort Giethoornse punters rondvaren, viel mijn oog op een eenvoudige houten brug (zie figuur 1). De constructie ervan fascineerde me meteen. Nieuwsgierig geworden kocht ik een informatiebrochure bij Queens' College en leerde daaruit dat deze koninklijke brug aangeduid wordt als de 'Mathematical Bridge' [16]. Gidsen vertellen steevast dat de wetenschappelijke reus Isaac Newton deze brug ontwierp. Wij geloven hen want het is voor deze rede van grote symbolische waarde. De eerlijkheid gebiedt echter te vermelden dat Newton stierf in 1727 en het eerste exemplaar van de brug werd gebouwd in 1747. Ik zal niet ingaan op de voordelen van de werktuigbouwkundige constructie die in deze brug is toegepast, hoewel sommigen aan de Universiteit Twente wiskunde schijnen te rekenen tot de construerende wetenschappen. Mij is dit dwaze denkbeeld een brug te ver.

De titel van deze rede brengt me er als vanzelf toe deze oratie in te delen in twee hoofdthema's:

1. Waarom werkt wiskunde in het algemeen?
2. Waarom werkt wiskunde voor polymeren?

Overigens is dezelfde tweedeling ook direct te herkennen in de omschrijving van mijn leeropdracht, die luidt: 'wiskundige modellering van kunststoffen'. Een praktijkvoorbeeld zal dienen als intermezzo en divertimento.

Laat ik vooraf vermelden dat ik me de afgelopen jaren intensief heb bezig gehouden met wiskundig modelleren voor het bedrijfsleven in de vorm van contractonderzoek. Ik heb daarbij met veel plezier aan een groot aantal, zeer diverse onderwerpen gewerkt. De huidige aanstelling aan de Universiteit Twente markeert het begin van een geleidelijke overgang naar een periode waarin mijn onderzoek zich voornamelijk zal concentreren op enkele gebieden, een transformatie van generalist naar specialist dus. Het eerste gedeelte van de oratie is vooral



'Vivid Art', Cambridge

Figuur 1 De 'Mathematical Bridge' (Queens College, Cambridge, UK) in een cartoon die de negatieve beeldvorming rond de wiskunde bevestigt.

Jaap Molenaar

ook voor polymeren?

gebaseerd op wat ik in het verleden wijzer geworden ben, het tweede gedeelte richt zich op mijn wetenschappelijke toekomst. Omdat het modelleren van polymeren een nogal technische bezigheid is zal ik de meeste tijd besteden aan het eerste deel.

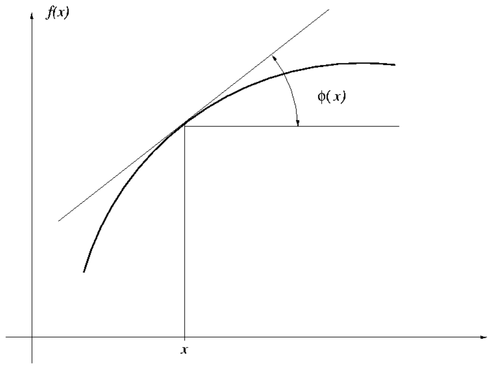
Wetenschap, wiskunde en modellen

Om aard en functie van wiskundig modelleren duidelijk te maken ga ik, in filosofisch opzicht, ver terug en vraag me af wat wetenschap is. Een antwoord dat mij bevredigt luidt: wetenschap is het op een systematische manier onderzoeken van in de schepping gelegde structuren. Zie ook [7]. De eerste activiteit van een wetenschapper in een nog onontgonnen gebied zal bestaan uit observeren en classificeren: de gegevens netjes rangschikken. Een standaardvoorbeeld is de bioloog die het planten- en dierenrijk indeelt in rijken, stammen, klassen, ordes, families en soorten. Maar ook een theoloog die een dogmatiek wil schrijven zal in eerste instantie niets anders doen dan de bijbelse gegevens ordenen. Overigens, ordenen is niet zo eenvoudig als het lijkt. Belangrijke vraag is uiteraard welk ordeningsprincipe de wetenschapper hanteert. De gebruikelijke indeling van de vogels op grond van uiterlijke kenmerken blijkt finaal ondersteboven te gaan als de basenvolgorde van het DNA, een moleculair kenmerk dus, als leidraad genomen wordt [14].

Verreweg het grootste deel van wetenschappelijk werk bestaat uit het modelleren van veranderingen in de tijd en plaats, de dynamica van structuren. Het modelleren van deze dynamica kan op vele manieren plaatsvinden. Altijd zal er een wetenschappelijke taal nodig zijn om relaties aan te duiden. Voor sommige gebieden is wiskunde de bij uitstek geschikte taal. Die rekenen we tot de exacte vakken. Wat is het eigene van de wiskunde? Wiskunde hangt ten nauwste samen met het menselijk vermogen om te kunnen abstraheren. We kunnen leren tellen en als we één, twee, drie, . . . uitspreken behoeven we er niet per se achteraan te zeggen of denken dat het om leden van het College van Bestuur, studenten of bezuinigingen gaat. We kunnen in termen van ‘objecten’ denken, waarbij alleen zekere eigenschappen ervan voor ons van belang zijn; niet of het object ‘echt bestaat’, gerealiseerd is in de omringende werkelijkheid. Wel moet ik daarbij onmiddellijk opmerken dat alle abstraheren in eerste instantie zijn inspiratie put uit de waargenomen werkelijkheid buiten ons. De meetkundige stoeit met abstracte punten, lijnen en vlakken omdat hij realisaties ervan voortdurend om zich heen ziet, al is geen enkele gerealiseerde lijn oneindig dun en geen enkel gerealiseerd punt verdwijnend klein. Uitgaande van de definiërende eigenschappen van een verzameling objecten is wiskunde de kunst om via logisch redeneren de daarbij behorende structuren te ontdekken. Dit leidt tot een wiskundige theorie. Als die definiërende eigenschappen goed passen bij één of ander meetbaar verschijnsel, noem ik die theorie een wiskundig model voor dat verschijnsel en noem ik dat verschijnsel een realisatie van dat model. Het generieke van de wiskunde uit zich hierin dat één wiskundig model vele realisaties kan hebben. Dezelfde vergelijkingen duiken in talloos veel verschillende gebieden op. De wiskundige brug heeft een bonte populatie aan passanten.

Wiskundig modelleren

Ik zal nooit vergeten hoe ik op de middelbare school in extase geraakte toen ik me voor het eerst bewust werd dat wiskunde de natuurlijke taal is voor de natuurkunde. In de wiskundeles werd er verteld over functies $f(x)$ waar je grafieken van kon tekenen. Als je wilde weten of f rond zekere x veel varieerde, bleek je de raaklijn aan de grafiek in dat



Figuur 2 Meetkundige interpretatie van 'afgeleide functie'

punt te moeten trekken. De helling van die raaklijn was dan een maat voor de variatie. Als u goed kijkt naar de 'wiskundige brug' in figuur 1 ziet u dat deze bestaat uit lijnen die raken aan een denkbeeldige boog. Tussen haakjes: de brug illustreert fraai het wiskundige principe dat een curve op een translatie na equivalent is met de verzameling van zijn geordende raaklijnen. En vervolgens voerde de wiskundeleraar de afgeleide functie, notatie $f'(x)$, in via de definitie:

$$f'(x) = \tan\varphi(x),$$

waarbij $\varphi(x)$ de hoek is aangegeven in figuur 2. Mooi abstract allemaal, maar waar het voor diende bleef duister. Vervolgens naar de natuurkundeles. Daar sprak de leraar op zeker moment over puntmassa's — heel vreemde objecten overigens, met gewicht maar zonder afmetingen — die een baan $x(t)$ volgden, waarbij x de positie was op tijdstip t. Als zo'n puntmassa bewoog bleek z'n snelheid $v(t)$ gegeven te worden door de afgeleide functie van $x(t) : v(t) = x'(t)$. Ik stond perplex: wat ik bij wiskunde in abstracto te horen kreeg, bleek bij natuurkunde een huis-, tuin-, en keukeninterpretatie te hebben. Wisten de leraren het zelf eigenlijk wel? Hadden ze het door? Van de natuurkundeleraar kon ik dat nog wel geloven, bij de wiskundeleraar had ik m'n twijfels.

Sinds die tijd heeft de combinatie van wiskunde en natuurkunde altijd mijn grote voorliefde gehad. U begrijpt mijn blijdschap over het feit dat deze zwak voor de mathematische fysica — liever spreek ik van fysische mathematica — bij mijn huidige benoeming goed tot zijn recht kan komen. Overigens, later leerde ik dat mijn extase niet erg terecht was. De infinitesimaalrekening, waartoe het differentiëren van functies behoort, is ontwikkeld door Newton en Leibniz toen deze nadachten over de basisprincipes van de mechanica. Geen wonder dat dan de ontwikkelde taal en het beschreven fenomeen goed passen. Wat echt reden tot verwondering moet geven is dat wiskundige modellen zo'n grote geldigheid blijken te bezitten. Als de basisingrediënten van een model goed aansluiten bij de essentiële kenmerken van het te beschrijven systeem, blijken alle structuren van het model te corresponderen met structuren van het systeem. Wigner vatte dit bondig samen in de titel van zijn bekende artikel *The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural sciences* [19]. De kern van wiskundig modelleren is te ontdekken welke eigenschappen van een systeem essentieel zijn.

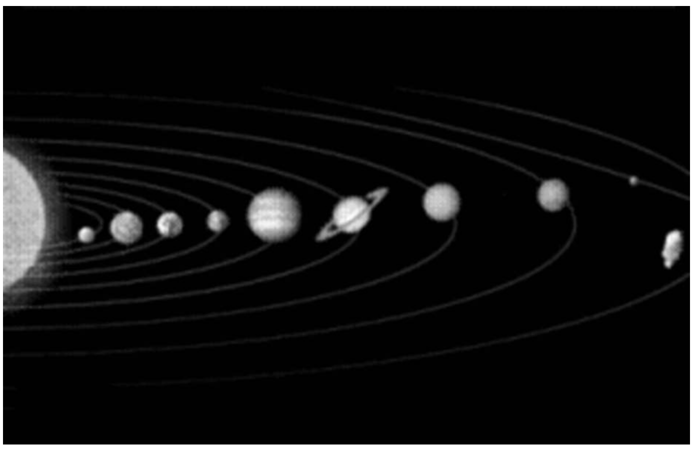
Over de relatie tussen het beschreven systeem en het beschrijvende wiskundige model hebben al vele filosofen zich het hoofd gebroken [12]. Er zijn zelfs filosofen die zo ver gaan [11] te beweren dat alles wat ons brein aan wiskundige theorie verzint, ook ergens in het heelal een realisatie heeft. Ik betwijfel dit. Onze Schepper heeft ons uitgerust met fantasie en creativiteit — begrepen in het geschapen zijn naar Zijn beeld [20] — en daarmee kunnen wij zeer waarschijnlijk meer bedenken dan Hij zelf in de schepping heeft willen realiseren. Telkens als ik in een wiskundebibliotheek rondsnuffel word ik gesterkt in dit vermoeden. Trouwens, een blik in een willekeurig science-fictionboek heeft op mij hetzelfde effect.

Newton en ons planetenstelsel

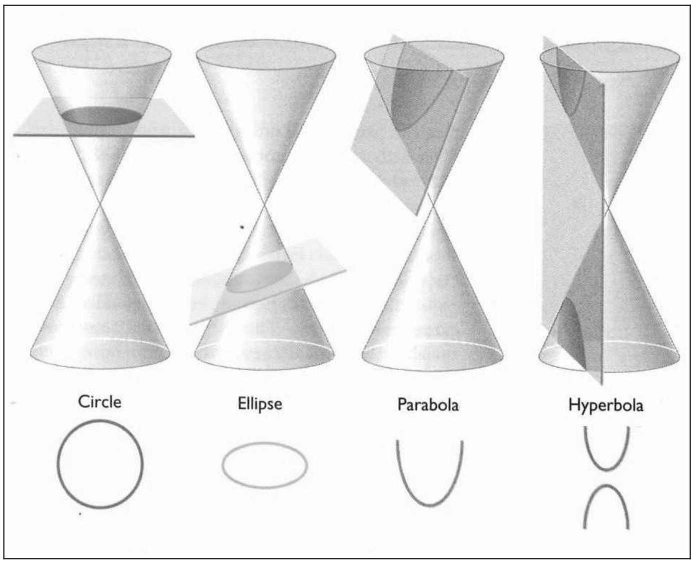
Een treffende illustratie van de kracht van wiskundig modelleren ontleen ik aan Newton. Hij kende de nauwkeurige waarnemingen van Brahe aan de planetenbewegingen en de daarop gegronde wetten van Kepler. De planeten draaien in bijna perfecte ellipsvormige banen rond de zon (zie figuur 3). Als ik aan ons planetenstelsel denk, associeer ik het onmiddellijk met het getal 2. Ik zal uitleggen waarom. De planeten blijven in de buurt van de veel zwaardere zon omdat ze daarvan een aantrekkende kracht ondervinden. Newton stelde voor het planetenstelsel een wiskundig model op met als ingrediënten de zon en planeten (gemodelleerd als puntmassa's), zijn beroemde wet $F = ma$ (kracht is massa maal versnelling) en een uitdrukking voor de kracht die twee massa's m_1 en m_2 op elkaar uitoefenen. Hij nam aan — ik zou het zelf ook zo gedaan hebben, dus daarin zit het geniale niet — dat die kracht gericht is langs de verbindingsas van de massa's en dat de grootte F_{12} de volgende vorm heeft:

$$F_{12} = G\frac{m_1 m_2}{r^p}.$$

Hierin is G een constante en r de afstand tussen de massa's. De parameter p is een positief getal. De precieze waarde ervan was een brandende vraag. Door middel van metingen was in de tijd van Newton de waarde van p niet te bepalen. Het is nog steeds een heel moeilijk experiment omdat we nu eenmaal lastig twee massa's kunnen isoleren van de rest van de materie in het heelal. Newton schatte de waarde van p eerst uit de baan van de maan. Later onderzocht hij welke planetenbanen zijn model toestond. Als kundig modelleerder verwaarloosde hij daarbij in eerste instantie de krachten tussen de planeten onderling. Nu, zo'n 300 jaar later, is dit nog steeds een stevige opgave voor onze studenten. Voor $p = 3$ bijvoorbeeld voorspelt het model dat een planeet of op de zon botst of zich in een onbegrensde baan van de zon verwijdert. Hij zag in dat hij alleen ellipsvormige banen vond indien hij $p = 2$ koos. Er bleek in dat geval een magnifieke verbinding te zijn tussen zijn dynamisch model en de meetkundige theorieën over kegelsneden van de oude Grieken (zie figuur 4). Het model geeft aan dat er ook parabool- en hyperboolbanen mogelijk zijn. Zoals zo vaak gebeurt tijdens modelleren: het model onthult meer structuur dan men aanvankelijk vermoedde. Newtons prestatie was een geweldige triomf voor het wiskundig modelleren. Let wel, het betreft hier een theo-



Figuur 3 Ons planetenstelsel. De bijna perfect ellipsvormige banen leidden tot de correcte modellering van de zwaartekracht.



Figuur 4 Ellipsen behoren tot de familie van de kegelsneden.

retische conclusie, gemaakt met papier en potlood, zittend achter een bureau. De gepostuleerde wet voor de zwaartekracht beschrijft voor $p = 2$ perfect één van de vier fundamentele krachten die we kennen in de natuur.

Zuivere, toegepaste en industriële wiskunde

Laten we de wiskundewereld zelf eens modelleren. Startend met classificatie constateer ik dat er grofweg gesteld drie manieren zijn om wiskunde te beoefenen: zuivere, toegepaste en industriële wiskunde (zie figuur 5). Daarmee is overigens niet gezegd dat iedere individuele wiskundige slechts in één hokje past. Van ieder hokje geef ik een korte karakterisering.

Na oefening van ons abstractievermogen kunnen wij gerust objecten definiëren waarbij er geen sprake meer is van directe inspiratie door iets buiten ons. Het bestuderen van wiskundige theorieën wordt zuivere wiskunde genoemd. De term suggereert merkwaardigerwijze dat iedere associatie van de objecten met waarneembare verschijnselen tot bezoedeling leidt. In de zuivere wiskunde ontdekt men structuren van grote schoonheid. De vreugde hierover kan mijns inziens alleen maar toenemen als dezelfde structuur ook buiten de wiskunde blijkt voor te komen. Zuivere wiskunde is 'l'art pour l'art' en een belangrijk cultureel erfgoed. Een fraaie verwoording hiervan trof ik aan in een afscheidsrede getiteld 'Pleidooi voor meer nutteloosheid' [1].

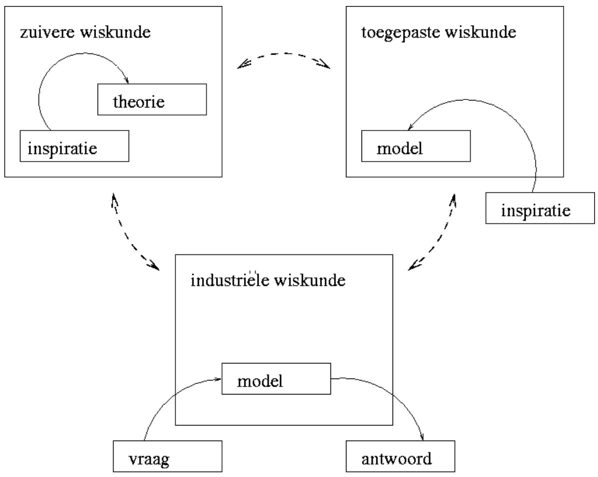
In de toegepaste wiskunde vindt men z'n inspiratie steeds van buitenaf. Men speelt met wiskundige modellen en de formules daarin hebben een niet-wiskundige interpretatie. Men concentreert zich op de analyse van generieke modellen. Toepassing daarvan is echter geen hoofddoel.

In de industriële wiskunde of bedrijfswiskunde — ingeburgerde doch nare termen, ik prefereer de term 'wiskunde toegepast' - houdt men zich bezig met het beantwoorden van heel concrete vragen met behulp van wiskundige modellen. Centraal staat niet het model, maar het beantwoorden van de vraag. Mijn ervaring is dat de hiervoor benodigde expertise zo groot is dat je dit beter niet volledig kunt overlaten aan niet-wiskundigen. Naast wiskundige expertise hebben industrieel wiskundigen nog extra eigenschappen nodig, zoals flexibiliteit en vermogen tot communicatie. Terwijl de zuiver en toegepast wiskundigen hun tijd en vernuft besteden aan het bereiken van wiskundige diepgang en daarbij introvert bezig kunnen zijn, gebruikt de industrieel wiskundige zijn tijd en vernuft om de complexiteit van problemen te beheersen. Hij doet dat altijd in samenwerking met anderen. Bedenk dat zowel conceptualiteit als complexiteit kunnen leiden tot boeiende research. Ik moet helaas constateren dat er binnen de Nederlandse wiskundewereld vaak weinig erkenning, herkenning en waardering is voor elkaars activiteiten. Zuiver wiskundigen die neerkijken op de andere twee categorieën, industrieel wiskundigen die vinden dat toegepast wiskundigen zo onnodig lang kunnen zaniken over existentie en uniciteit, toegepast wiskundigen die zuivere wiskunde verloren tijd vinden, je komt ze allemaal tegen. Deze wat benepen hokjesgeest is niet bevorderlijk voor de beeldvorming van de wiskunde als geheel, waarbij we nog altijd moeten opboksen tegen de heersende idee dat wiskundigen wel erg knap, maar ook erg wereldvreemd en nutteloos zijn. Dat leidt tot cartoons als in figuur 1. Juist in deze tijd van dramatisch slinkende studentenaantallen is een gezamenlijk optrekken van levensbelang voor wiskundig Nederland.

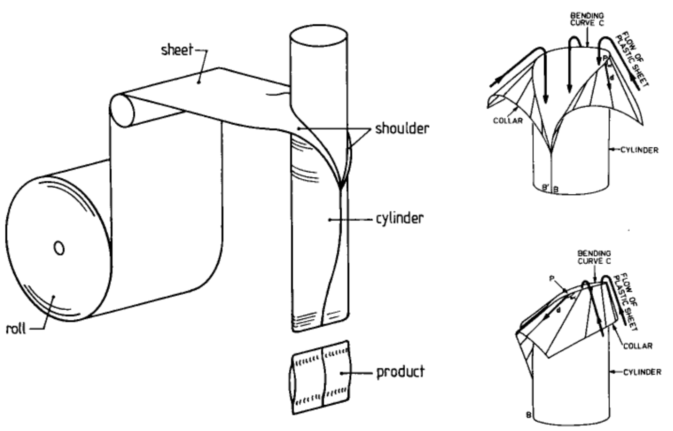
Ik vind het aardig om het verschil tussen toegepaste en industriële wiskunde te illustreren met een voorbeeld uit mijn eigen praktijk. Vandaar het volgende intermezzo.

Wiskundige schouders

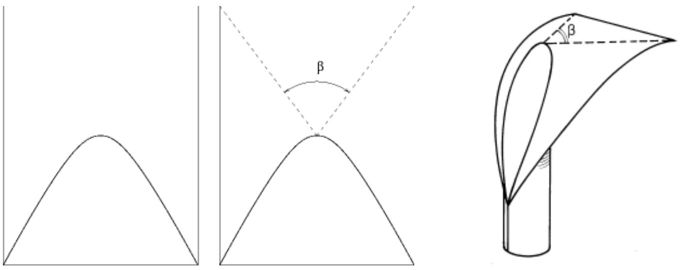
Het is vrijdagavond. Al maanden worstelen collega Boersma en ik met een weerbarstige vraag vanuit de verpakkingsindustrie. Men had bij mij aangeklopt voor het ontwerpen van een onderdeel van een verpakkingsmachine. Aanvankelijk liep het project op rolletjes. Collega Rienstra was komen aanzetten met een nuttig artikeltje over dit onderwerp. Het benodigde wiskundige model stond ons helder voor ogen. Jammer dat die ene vraag was opgedoken. Echt zo'n vraag die door je hoofd blijft malen. Een vraag die het project nu al maanden ophield. In de verpakkingsindustrie is de vorm-, vul- en sluitmachine heel populair. Het principe is weergegeven in figuur 6. Het verpakkingsmateriaal — papier of polymeerfolie — bevindt zich aanvankelijk op een horizontale rol. Bij het afrollen is het vlak. Via een 'schouder' wordt het tot een verticale cilinder gevouwen. Deze transformatie kan overigens niet worden uitgevoerd zonder het materiaal ergens te knikken. De verticale naad van de cilinder wordt dichtgemaakt — ge-'sealed' is de vakterm — en ook onderaan komt er een horizontale afdichtingsnaad. Zo ontstaat er een zakje. Via een robotarm of een lopend bandje wordt het te verpakken materiaal — bijvoorbeeld snoepjes of kattenvoer — in het zakje gedeponeerd, dat vervolgens aan de bovenkant met een horizontale naad wordt afgedicht. Op zo'n machine kunnen honderden gevulde zakjes per minuut geproduceerd worden. Let u er in de



Figuur 5 Zuivere, toegepaste en industriële wiskunde

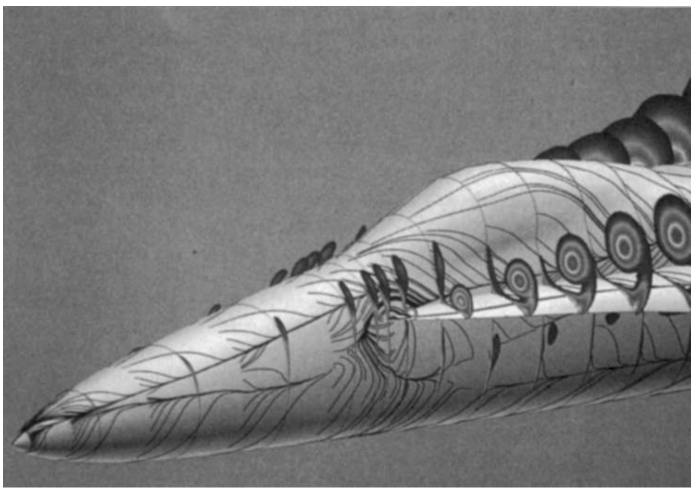


Figuur 6 Schematische weergave van een vorm-, vul- en sluitmachine. Rechts de schouder.



Figuur 7 Links en midden: de schouder getransformeerd naar het platte vlak. De driehoek met tophoek β blijft na terugtransformatie vlak (zie rechter plaatje) als de curve een discontinuïteit in de derde afgeleide bevat op het hoogste punt. Rechts: een schouder met een vlakke driehoek.

supermarkt eens op: alle zakjes met drie naden zijn op dergelijke wijze vervaardigd. Wiskunde zit werkelijk overal. Als de schouder niet exact de juiste vorm heeft, gaat het papier schuiven of kreuken en dat is ongewenst. Voor speciale maten heeft de industrie reeds min of meer ideale schoudervormen gevonden door vijlen en schaven. Maar de markt is dynamisch en vandaar de vraag aan mij of het mogelijk is bij een willekeurig type zakje een geschikte schouder te ontwerpen. Fraai is het om dan te zien hoe oeroude differentiaalmeetkunde plotseling actueel wordt. Omdat het verpakkingsmateriaal niet mag rekken en kreuken tijdens het vervormen, moeten alle afstanden behouden blijven. Dat heeft grote consequenties: het schouderoppervlak moet een 'ontwikkelbaar oppervlak' zijn. Ontwikkelbare oppervlakken behoren tot de familie van regeloppervlakken. Dat houdt in dat het schouderoppervlak is opgebouwd uit rechte lijnen. Tot deze verrassende conclusie kan niemand komen zonder de koninklijke brug van het wiskundig modelleren te hebben bewandeld.



Figuur 8 Turbulente stroming rond een vliegtuigromp

Schouders worden in de praktijk gemaakt uit kunststof of plaatstaal. De kunststofschouders slijten hard en daarom is er veel vraag naar de plaatstalen exemplaren. Je kunt die maken door een curve te krassen in een plaat staal: het gedeelte onder de curve wordt naar voren toe rond een cilinder gevouwen terwijl het gedeelte boven de curve naar achteren wordt geduwd (zie figuur 7). Wij meenden alle facetten van de procedure te beheersen tot de vraag kwam of we het schouderoppervlak ook een vlakke achterrand konden geven. Dan pas zou het aanvankelijk vlakke materiaal, komend van de rol, ideaal aansluiten bij de schouder. Ik had hierover al met veel mensen gesproken. Niemand herkende dit soort problemen, maar een suggestie van collega Hendriks uit Nijmegen zette ons op het goede spoor. Uit de constructie is duidelijk dat de curve ingekrast in het staal alle informatie bevat over het geproduceerde schouderoppervlak. Als de schouder een vlakke achterrand heeft, moet hij een vlak gedeelte bevatten. Dit kan alleen als de curve één of andere discontinuïteit bevat. Dat het niet de eerste afgeleide betrof was direct duidelijk. We hadden die ochtend afgesproken dat Boersma het effect van een discontinuïteit in de tweede afgeleide zou onderzoeken, terwijl ik me zou concentreren op de derde afgeleide. Natuurlijk bekijk ik ze stiekem allebei. Gezeten aan de keukentafel heb ik de sensationele ervaring alle puzzelstukjes in elkaar te zien passen: een discontinuïteit in de derde afgeleide op het hoogste punt van de curve heeft als effect dat er in het schouderoppervlak een vlakke driehoek ontstaat. Precies wat we nodig hebben. Deze ontdekking maakt alle geploeter meer dan goed. Om het samen te vatten: de tophoek van de driehoek (zie figuur 7) wordt gegeven door:

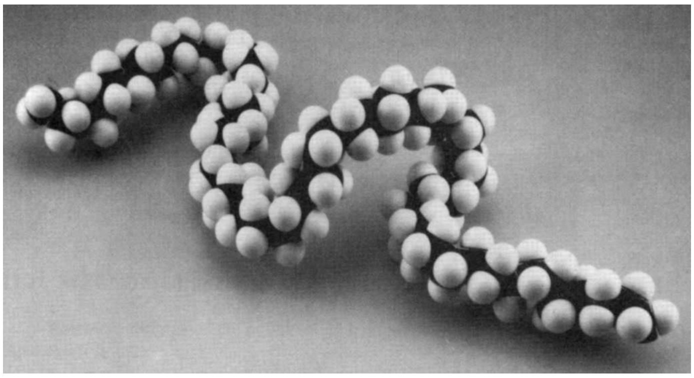
$$\beta = 2 \arctan \left[\frac{\Delta f'''}{(f'')^2 + 1} \right],$$

met de tweede afgeleide f'' en de sprong in de derde afgeleide $\Delta f'''$ geëvalueerd in het hoogste punt van f (zie [2]). Achter zo'n koele formule gaat veel emotie schuil. In figuur 7 is een schouder met zo'n vlakke driehoek getekend. De discontinuïteit heeft een onzichtbare invloed op de vorm van de curve. Een subtiliteit met grote gevolgen! We weten door dit inzicht in welke klasse functies we moeten zoeken bij schouderontwerp. Het krijgen van dit inzicht is een typische activiteit van de toegepaste wiskunde. Het daadwerkelijk uitrekenen van schouders — een lastig invers probleem — behoort typisch tot wiskunde toegepast.

Toen ik de wiskundige brug in Cambridge zag was m'n eerste reactie niet: 'oh wat mooi', maar: 'wat zou de boog van deze brug opleveren als ik er de plaatstaalconstructie op toepas?'. Uitproberen levert op dat er een schouder met veel te kleine inloophoek resulteert. Zelfs wiskundigen zien soms verbanden die er niet zijn.

Wiskunde en polymeren

Toen ik bij de faculteit Toegepaste Wiskunde van de Universiteit Twente benoemd werd, was het niet moeilijk te kiezen in welke klasse modellen ik me zou specialiseren. Reeds vele jaren geleden ben ik via samenwerking met DOW Chemical geïnteresseerd geraakt in onderzoek aan polymeren en in het bijzonder in de reologie. Dit van oorsprong griekse woord betekent letterlijk stromingsleer. Dat is een immens breed gebied. Echter in vakkringen bedoelt men met reologie specifiek het stromingsgedrag van ingewikkelde stoffen zoals polymeren. Reeds voor 1900 waren de centrale behoudswetten van de stromingsleer bekend. Zij representeren een machtig wiskundig model waarin de stromende materie als een continuüm wordt beschreven en de moleculaire details worden uitgemiddeld. De eigenschappen van de stromende stof zijn in het model opgenomen via een constitutieve relatie, een wiskundige uitdrukking die aangeeft hoe de spanningen in het betreffende materiaal samenhangen met de vervormingen. Voor bekende materialen als water en lucht voldoet een constitutieve relatie die reeds door — alweer — Newton is bedacht. Vanuit het perspectief van de reologie moet ik materialen die bestaan uit min of meer bolvormige moleculen relatief eenvoudig noemen. In vaktermen: ze gedragen zich Newtons. Dat betekent overigens niet dat de berekeningen aan zulke stromingen gesneden koek zijn. Integendeel, één van de centrale problemen in de stromingsleer van de 20ste eeuw was de turbulentie. Collega Van der Vegt heeft er enige tijd geleden zijn oratie aan gewijd [15]. Een nette stroming, waarin alle deeltjes zich ongeveer parallel voortbewegen, kan omslaan in een turbulente stroming met wilde wervelingen. Draaikolkjes in een riviertje en kringelende rook zijn er typische voorbeelden van (zie ook figuur 8). Veler verwachting — ook de mijne [10] — was dat de chaostheorie, die zich sinds 1963 razendsnel ontwikkeld heeft [5], hier voor een doorbraak zou zorgen. Hoewel de chaostheorie belangrijke concepten, zoals 'vreemde aantrekker' en het onvertaalbare 'multifractal', heeft aangedragen, confronteert turbulentie ons ook in de 21ste eeuw nog met raadsels [18].

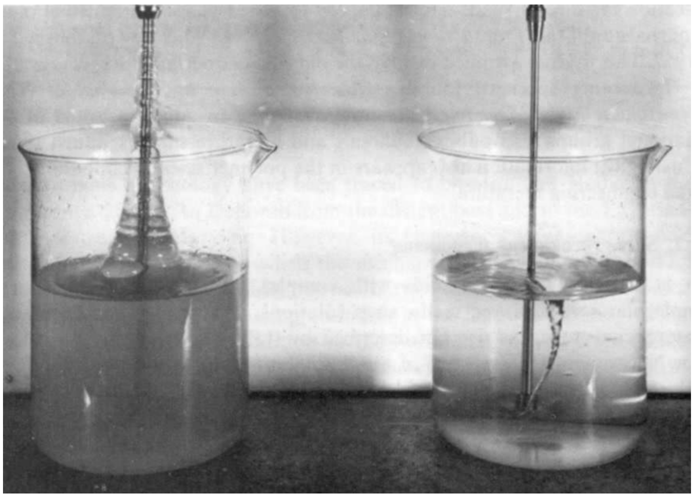


Figuur 9 Model van een polymeer

Mijn werkzaamheden aan de Universiteit Twente hebben hopelijk geen last van turbulentie. Polymeren vormen in gesmolten toestand zo'n kleverig goedje — in de vaktermen: ze zijn zo visceus — dat ze niet toekomen aan wild wervelen. Ze vertonen echter andere interessante verschijnselen tijdens het stromen. Die komen voort uit hun bijzondere moleculaire structuur. Het zijn enorm lange ketens waarin de basiseenheid, de monomeer, zich duizenden keren herhaalt (zie figuur 9). Het is duidelijk dat de interactie tussen zulke ketens een heel ander karakter heeft dan die tussen bolvormige objecten, zoals we die eerder tegenkwamen in ons planetenstelsel en in Newtonse vloeistoffen. De polymeerketens slingeren zich als extreem lange slangen rond elkaar. En denkt u nu niet dat het een statische boel is in zo'n slangenkuil. Door de thermische energie is het er een geweldig gekronkel en verandert de toestand van milliseconde tot milliseconde. Polymeren vertonen zeer onverwacht gedrag. Een standaardvoorbeeld is het Weissenbergeffect, voor het eerst gemeten in 1947, waarbij een polymeersmelt tegen de roterende roerstaaf opkruipt in plaats van tegen de wand (zie figuur 10).

Modelleren van polymeergedrag

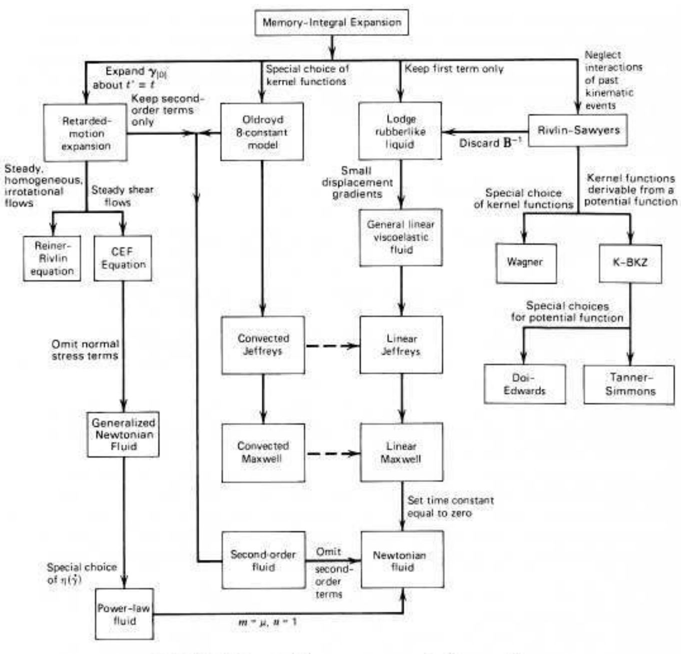
Het wiskundig modelleren van het constitutief gedrag van dergelijke complexe systemen vormt een grote uitdaging. Ze reageren niet instantaan — dat wil zeggen dat er op ieder moment een unieke relatie



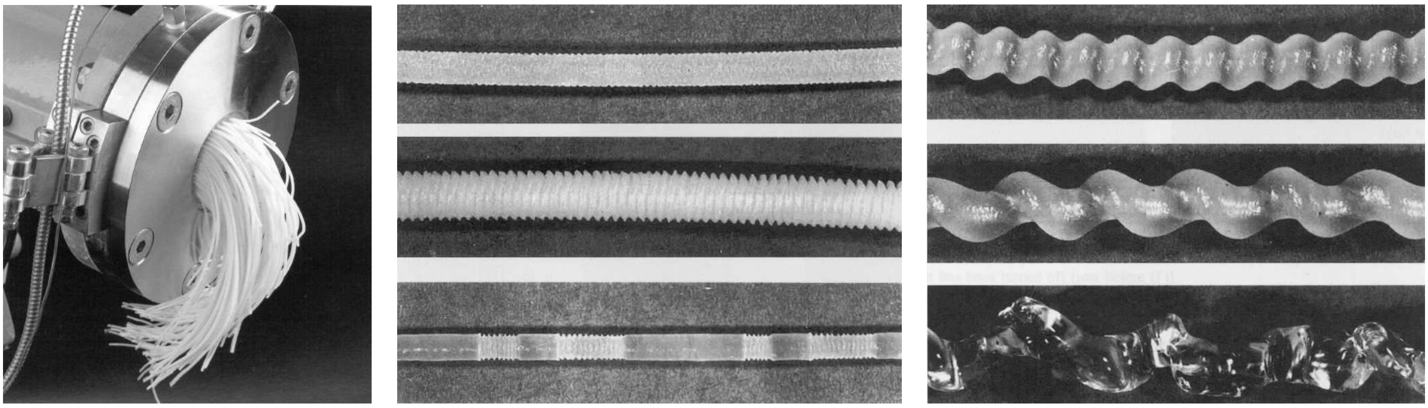
Figuur 10 Het Weissenberg-effect. Rechts Newtons gedrag, links polymeergedrag.

is tussen spanning en vervorming — maar de spanning op dit moment hangt af van de deformatiegeschiedenis van het materiaal. Of met een knipoog naar onze maatschappij: niet de waan van de dag regeert, maar de eeuwenoude cultuur spreekt een duchtig woord mee. Er bestaan reeds vele constitutieve modellen.

In figuur 11 zijn de in 1988 bekende modellen in beeld gebracht met hun onderlinge relaties. Een nogal verwarrende collectie. De kracht van een wiskundig model wordt bepaald door de mate waarin het experimentele waarnemingen kan beschrijven. Naarmate de overeenkomst beter is, gaan we ook meer waarde hechten aan de voorspellingen van een model. Bij polymeren is het aantal waargenomen verschijnselen zo uiteenlopend dat geen enkel model ze alle bevredigend beschrijft. We weten nog niet eens wat de essentiële kenmerken zijn. Aanvankelijk probeerde men min of meer op de gok allerlei constitutieve relaties op te stellen. De wiskunde bleek hierbij al snel een dominante rol te spelen. Oldroyd [13] besefte dat een constitutieve relatie alleen acceptabel is als deze voldoet aan een aantal eisen, waarvan de voornaamste is onafhankelijkheid van het gebruikte coördinatenstelsel. Al zetten we



Figuur 11 Constitutieve modellen en hun onderlinge relaties (1988)

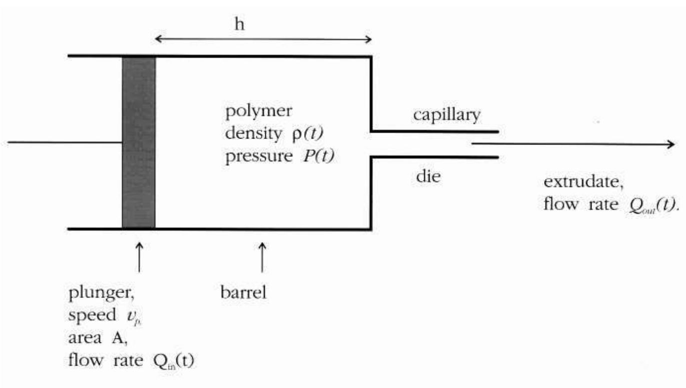


Figuur 12 Links: extrusie van polymeerdraden. Midden en rechts: vervormingen van polymeerdraden na extrusie.

de experimentele opstelling op een door de lucht vliegende, roterende schijf, de interne relaties op moleculair niveau worden er niet door beïnvloed. De wiskundige consequentie daarvan is dat de tensortaal het geëigende wiskundige dialect is voor de modellering. Met tensorrekening zal ik u niet vermoeien, maar alleen memoreren dat Einstein er bij het formuleren van de algemene relativiteitstheorie grote baat bij gehad heeft.

Reptatietheorie

Natuurlijk komen de beste modellen niet voort uit lukraak mogelijkheden proberen, maar door het in rekening brengen van de onderliggende structuur. Het is voor de kunst van het modelleren essentieel goed te beseffen welke afmetingen, oftewel schaal het te beschrijven systeem heeft. De schaal van een planetenstelsel is totaal verschillend van de schaal van ons dagelijks leven, die op zijn beurt weer reusachtig groot is ten opzichte van de moleculaire schaal. Deze verschillende schaalniveaus hebben eigen wetmatigheden [6]. Eigenschappen op een zeker niveau komen in modellen één niveau hoger terug op een globale manier, na toepassing van een middelingsprocedure. In de reologie staat deze overgang van de moleculaire wereld naar het niveau van de continuümsmechanica volop in de belangstelling. Een pionier op dit gebied is De Gennes die met grote fantasie en kunde een model opstelde voor de dynamica van een slang in een propvolle slangenkuil [4]. De aanpak is bekend onder de naam *reptatietheorie*. U herkent daarin dezelfde stam als in 'reptiel'; het is afkomstig van het latijnse 'reptare' dat sluipen betekent. Het betreft hier geen oppervlakkig geknutsel: De Gennes ontving voor zijn bijdragen aan het vakgebied de Nobelprijs. Voor ervaren modelleerders zal het geen verwondering wekken dat in reptatietheorie de diffusievergelijking een grote rol speelt.



Figuur 13 Sterk geschematiseerde doorsnede van een extruder

Onderzoek aan polymeerextrusie

Reptatietheorie zal zeker een belangrijke plaats innemen in mijn onderzoek. Dat onderzoek richt zich vooreerst op het wiskundig modelleren van merkwaardige verschijnselen bij extrusie van polymeren. In figuur 13 is een dwarsdoorsnede van een sterk geschematiseerde extruder getekend.

We zien hier een soort slagroomspuit gevuld met gesmolten polymeer. Bij lage snelheden van de zuiger komt het als gladde pasta uit de tuit (zie figuur 12). Op enige zwelling direct na het uittreden na is er niets bijzonders aan de hand. Voeren we de snelheid van de zuiger op, dan kan het oppervlak van het extrudaat grillige of regelmatige ribbels gaan vertonen (zie figuur 12). En wat voor slagroom wel een aardig effect vormt, is voor de polymeerindustrie een ramp. Men noemt de oppervlakteruwheid 'sharkskin' oftewel haaienhuid, omdat de huid van een haai vanwege placoïdschubben eenzelfde ruwheid vertoont. Een ander effect dat kan optreden is het 'spurteffect': de smelt komt pulserend uit de tuit. Of nog erger, het komt er geheel verfrommeld uit. De volgorde waarin deze verschijnselen optreden hangt af van de structuur van het polymeer en de geometrie van de extruder. Reologen duiden deze verschijnselen allemaal aan als instabiliteiten. Met het wiskundige begrip instabiliteit heeft dat niet veel te maken, wel met het begrip bifurcatie: als de zuigersnelheid wordt opgevoerd, kan het systeem bij een kritische snelheid plotseling een ander gedrag gaan vertonen. Hoewel de verschijnselen al meer dan 50 jaar bekend zijn, is men er nog niet zeker van welke mechanismen precies een rol spelen. Er is dringend behoefte aan een goed wiskundig model voor polymeerextrusie. Zo'n model moet niet alleen de diversiteit aan verschijnselen kunnen beschrijven, maar ook aangeven hoe de kritische waarden afhangen van de moleculaire structuur en de extrudergeometrie. Die kennis zou het mogelijk moeten maken polymeren te ontwerpen met hoge kritische waarden en dus hoge productiesnelheden. Via het door de Europese Unie gefinancierde project Postponing Polymer Processing Instabilities (3PI) werk ik op dit onderwerp samen met negen partners in Europa. Wiskunde speelt hierin een sleutelrol.

Slipcondities

Mijn onderzoek van de afgelopen jaren leidde tot de conclusie dat ook de meest geavanceerde constitutieve modellen niet geschikt zijn om een verschijnsel als het spurteffect te beschrijven. Bij deze spannende zoektocht samen met promovendus den Doelder [3] bleek dat er een ingrediënt ontbrak aan onze modellering. Zoals gebruikelijk waren we begonnen met te veronderstellen dat de snelheid van de smelt aan de wand nul is. Het bleek dat we voor het modelleren van het spurteffect moesten toestaan dat er slip optreedt langs de wand. Experimenten, waarin de gladheid van de wand gevarieerd wordt, bevestigen dit [17]. Maar het is nog niet duidelijk hoe deze slip gemodelleerd moet worden. Naast de bekende Coulombse wrijving treedt er het effect op dat een keten zich op één of meer plaatsen kan hechten aan de wand. De verstrengeling van de vastzittende ketens met de andere ketens zorgt voor een wrijving die sterk af zal hangen van de locale configuratie. Als de spanning dicht bij de wand oploopt, kunnen de aan de wand gehechte ketens losraken, breken en/of 'ontstrengelen' van hun buurketens. Een scenario dat het spurteffect zou kunnen verklaren is als volgt. Als de spanning aan de wand hoog oploopt, 'ontstrengelen' veel ketens tegelijk, wat op continuümsniveau geïnterpreteerd moet worden als slip aan de wand. Door deze slip zal de spanning zich snel ontladen, waarna er opnieuw verstrengeling optreedt. Als dit zich regelmatig herhaalt, zal dit leiden tot pulserend gedrag. Of dit inderdaad tot een bevredigend model leidt is het onderwerp van een promotieonderzoek waarvoor zeer onlangs financiering van de Stichting Technische Wetenschappen is verkregen. Het aardige van het project is dat er twee aio-plaatsen beschikbaar zijn gekomen, één bij Toegepaste Wiskunde en één bij Technische Natuurkunde. Zodoende zal het project een brede opzet hebben, van het opstellen en analyseren van wiskundige modellen tot en met het uitvoeren van experimenten. De wiskundige analyse van modellen gebaseerd op de standaard geen-slipconditie is al lastig. De nog te ontwikkelen slipcondities zullen het er niet gemakkelijker op maken. Maar dat zal het plezier niet temperen. In Intermediair stond een verslag van een vorig jaar aan de Faculteit Toegepaste Wiskunde georganiseerde Studiegroep van wiskundigen [8]. De journalist tekende uit de mond van één der deelnemers de kreet op: 'Ha, lekker een probleem'. Dat karakteriseert de wetenschappelijke grondhouding prima.

Besluit

Volgens de regelen der kunst moet ik nu weer terugkomen op mijn inleiding. De wiskundige brug in Cambridge is in hout uitgevoerd en moest in 1866 en 1905 geheel vernieuwd worden. Misschien dat de chemische industrie, als eerbetoon aan de wiskunde, hem bij de volgende beurt wel in kunststof wil uitvoeren.

Tenslotte, u vraagt zich nu ongetwijfeld af of ik wel antwoord heb gegeven op de vraag in de titel van deze oratie. Laat ik er ronduit voor uitkomen: natuurlijk heb ik geen antwoord op de vraag waarom God onze Schepper zoveel wiskundige structuren in Zijn schepping gelegd heeft. Wetenschap geeft nooit antwoord op 'waarom'-vragen en uit andere bronnen weet ik het ook niet. Laten we als wetenschappers, bij alle theoretiseren, observeren, classificeren, modelleren, analyseren en publiceren, het verwonderen en vooral het bewonderen niet vergeten.

Literatuur

1 A. van den Beukel, *Pleidooi voor meer nutteloosheid*, afscheidsrede TUD, 7 februari 1997.

2 J. Boersma en J. Molenaar, 'Geometry of the shoulder of a packaging machine', *SIAM Review*, 37, no. 3, 1995, pag. 406–422.

3 C.F.J. den Doelder, *Design and Implementation of Polymer Melt Fracture Models*, Ph.D. thesis, Eindhoven University of Technology, ISBN 90-386-0701-6, 1999.

4 P.G. de Gennes, 'Reptation of a Polymer Chain in the Presence of Fixed Obstacles', *J. Chem. Phys.*, Vol. 55, no. 2, pag. 572–579, 1971.

5 G. Gleick, *Chaos, the making of a new science*, ISBN 0-14-00-9250-1, Penguin Books, 1988.

6 P. Jensen, 'Particle Physics and Our Everyday World', *Physics Today*, July 1998, pag. 58–59.

7 P.W. Kasteleyn, *Op zoek naar structuren*, inaugurale rede RUL, 5 juni 1964.

8 H. Klomp, 'Wiskundig orakel helpt Shell', *Intermediair*, 44, 2 november 2000, pag. 109.

9 R.M.M. Mattheij en J. Molenaar, 'Mathematics and Industry: Contamination or Fertilization?', *Nieuw Archief voor de Wiskunde*, 4e serie, deel 4, no. 3, november 1986, pag. 245–254 (ISSN 0028-9825).

10 J. Molenaar, J. Herweijer en W. van de Water, 'Negative dimensions of the turbulent dissipation field', *Phys. Rev. E*, Vol. 52, Part A, July 1995, pag. 496–509.

11 D.E. Neuenschwander, 'Does Any Piece of Mathematics Exist for which there is no Application whatsoever in Physics?', *Am. J. Phys.*, 63(12), 1995, pag. 1065. Zie ook het (ontkennende) antwoord op deze vraag van A.C. de la Torre en R. Zamorano, *Am. J. Phys.*, 69(2), 2001, pag. 103.

12 G.Y. Nieuwland, 'Do mathematical methods tell the truth', *Nieuw Archief voor Wiskunde*, 5e serie, deel 1, nr. 4, december 2000, pag. 406–411, en deel 2, nr. 1, maart 2001, pag. 59–64.

13 J.G. Oldroyd, 'An approach to non-Newtonian fluid mechanics', *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 14, 1984, pag. 9–46.

14 M. van Tuinen, 'Een moleculaire kijk op vogelevolutie', *Natuur en Techniek*, februari 2001, pag. 32–37.

15 J.J.W. van der Vegt, *Wiskundige simulaties als stromingsleerlaboratorium*, inaugurale rede Universiteit Twente, 9 december 1999.

16 R. Walker, *The History of the Mathematical Bridge*, University Press, Cambridge, zonder jaartal. Zie ook de website: www.quns.cam.ac.uk/Queens/Images/WinBridg.html

17 S.Q. Wang, P.A. Drda, 'Stick-slip transition in capillary flow of linear Polyethylene: 3. Surface conditions', *Rheol. Acta*, 36, 1997, pag. 128–134.

18 W. van de Water, *Stroming in Wanorde*, inaugurale rede KUN, 23 februari 2001.

19 E.P. Wigner, 'The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences', *Commun. Pure Appl. Math.* 13, 1960, pag. 1–14.

20 Genesis 1:26.