

## Wil Schilders

Faculteit Wiskunde en Informatica  
Technische Universiteit Eindhoven  
Postbus 513, 5600 MB Eindhoven  
w.h.a.schilders@tue.nl

### Inaugurale rede

# De toepassing als

De numericus Lloyd N. Trefethen omschreef numerieke wiskunde als het vakgebied waar algoritmen worden bestudeerd voor het oplossen van problemen uit de continue wiskunde. Deze problemen zijn meestal afkomstig uit de fysische werkelijkheid en worden dikwijls aangeleverd door industriële bedrijven. In deze oratie laat Wil Schilders zien, dat de studie van numerieke algoritmen ook de studie van de fysische werkelijkheid inhoudt. Hij pleit voor meer samenwerking met onderzoekers uit andere disciplines. Wil Schilders werd in het najaar van 2003 benoemd tot hoogleraar Numerieke Wiskunde voor de Industrie aan de Technische Universiteit Eindhoven.

Een van de meest gerenommeerde wiskundigen van de twintigste eeuw, G.H. Hardy, getaltheoreticus en onder collega's bekend als 'een echte wiskundige', schreef in zijn essay *A Mathematician's Apology* [1]: "Een van de eerste taken van een hoogleraar is het om het belang van zijn vakgebied enigszins te overdrijven, en tevens zijn eigen rol hierin." Graag maak ik van de gelegenheid gebruik om in deze rede het eerste te doen, en ik hoop dat

u de rede ook in dit licht wilt zien. Het tweede deel van Hardy's advies zal ik zo veel als mogelijk achterwege laten, aangezien er voldoende spreekwoorden en gezegden bestaan aangaande bescheidenheid.

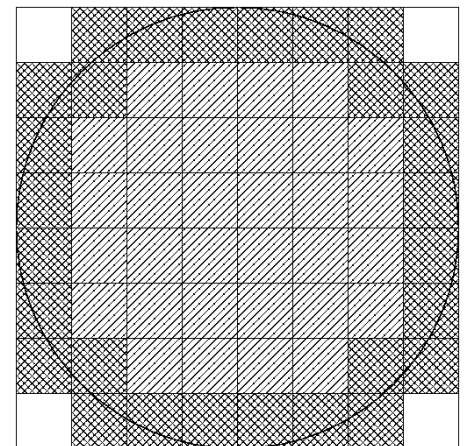
In deze rede wil ik graag het belang onderstrepen van mijn vakgebied, Numerieke Wiskunde voor de Industrie, en u een idee geven van de werkwijze die mij voor ogen staat. Numerieke wiskunde is een relatief jonge tak van wiskunde, de belangrijkste ontwikkelingen stammen uit de tweede helft van de twintigste eeuw. Toch is er al eerder aan methoden gewerkt die tot de numerieke wiskunde gerekend kunnen worden. Een van de oudste en bekendste voorbeelden is wel de benadering van  $\pi$ , een getal dat zeer tot de verbeelding van de oude Grieken sprak. Vierkantjes tellen binnen en buiten een eenheidscirkel, zoals geïllustreerd in figuur 1 en tabel 1, levert onder- en bovengrenzen op voor de waarde van  $\pi$  en zodoende hebben we ook meteen een idee van de nauwkeurigheid van de gebruikte benaderingen.

Hoewel het een antiek voorbeeld is, en er in de afgelopen twee millennia veel snellere en efficiëntere methoden voor de benade-

ring van  $\pi$  zijn ontwikkeld [2], geeft het wel de essentie van de numerieke wiskunde goed weer:

- met een eindig aantal bewerkingen een benadering vinden,
- uitspraken doen over de nauwkeurigheid van deze benadering.

Kenmerkend is dus de eindigheid van het proces dat uiteindelijk leidt tot de gewenste



**Figuur 1** Een benadering van de oppervlakte van een cirkel: de ondergrens is licht gearceerd, de bovengrens is donker gearceerd.



Wil Schilders

# leidraad

benadering. Dit proces wordt ook wel algoritme genoemd, volgens het *Groot Woordenboek der Nederlandse Taal* “een systematisch stelsel voor het uitvoeren van rekenkundige bewerkingen en de volgorde daarvan.” Maar ook, volgens dezelfde bron, “een strikt technische redeneermethode die geen menselijke intuïtie vereist.” Over dat laatste valt te redetwisten, en zeker als we het hebben over algoritmen die ontwikkeld worden voor het oplossen van industriële problemen. Daarover later meer.

Het tweede aspect is onlosmakelijk verbonden met het eerste. Een benadering waarvan men niet weet hoe nauwkeurig deze is, is

feitelijk nietszeggend. In bepaalde toepassingen kan het voldoende zijn om  $\pi$  te benaderen met 3, juist omdat we weten dat dit slechts vijf procent van de werkelijkheid af is. Ontberen we deze kennis, dan valt over het eindresultaat ook weinig te melden, hetgeen vooral in het bedrijfsleven een ongewenste situatie is. Later in deze rede komt een voorbeeld ter sprake waarin een gevonden ‘benadering’ een geheel foutieve, zelfs niet-bestaande, ‘oplossing’ bleek te zijn.

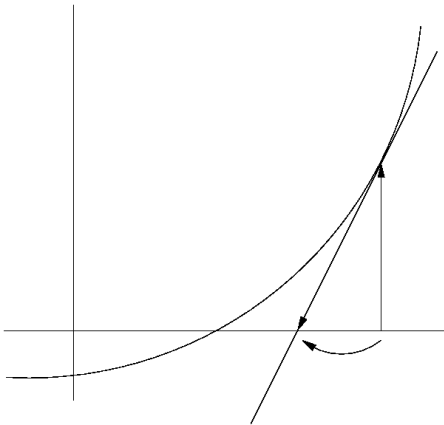
Naast genoemde aspecten zijn er nog verscheidene andere die een rol spelen bij de ontwikkeling van numerieke methoden. Snelheid en efficiency zijn voor de hand liggen-

de aspecten, tenslotte wil ieder een nauwkeurig antwoord op zo goedkoop en snel mogelijke wijze verkrijgen. Een minder voor de hand liggend aspect is robuustheid. Hiermee bedoelen we dat de algoritme bestand zou moeten zijn tegen allerlei negatieve invloedsfactoren. Een voorbeeld hiervan is het Newton-iteratieproces voor het bepalen van nulpunten van niet-lineaire vergelijkingen. In figuur 2 is dit proces voor een eenvoudig 1-dimensionaal voorbeeld weergegeven: vanuit het startpunt wordt de raaklijn aan de grafiek bepaald, en het snijpunt van deze raaklijn met de horizontale as wordt de nieuwe benadering. Dit proces kan herhaald worden met het nieuwe punt als startpunt van de zojuist beschreven procedure. Op deze manier ontstaat een iteratief proces, dat benaderingen oplevert die steeds dichterbij de oplossing komen te liggen.

Op het eerste gezicht (voor het getoonde voorbeeld) lijkt er geen vuiltje aan de lucht. Echter, er zijn voorbeelden te over waarbij dit proces slechts tot de gewenste oplossing leidt indien men het startpunt dicht genoeg bij deze oplossing kiest. Dat klinkt tegenstrijdig: men dient al kennis te hebben van de locatie

Aantal hor./vert.	Binnen cirkel	Benadering	Overlappend	Benadering
8	32	2	60	3.75
32	732	2.85938	856	3.34375
128	12596	3.0752	13104	3.19922
512	204836	3.12555	206880	3.15674
2048	3290000	3.13759	3298188	3.1454

Tabel 1 Verschillende benaderingen van  $\pi$ .



**Figuur 2** Het Newton-iteratieproces voor het bepalen van een nulpunt van een niet-lineaire vergelijking.

van de oplossing teneinde deze (nog) beter te kunnen benaderen. In deze zin is de algoritme dus niet robuust: een willekeurig gekozen startpunt zou wel eens kunnen leiden tot een niet-convergerend iteratief proces.

Robuustheid kent echter vele kanten. Zelfs al starten we het Newton-proces dicht genoeg bij de oplossing om convergentie te kunnen garanderen, dan nog is het mogelijk dat zich ongewenste fenomenen voordoen. Een voorbeeld hiervan komen we tegen bij het oplossen van halfgeleiderproblemen. Deze notoir niet-lineaire problemen vertonen een vreemd gedrag ten aanzien van het Newton-proces: extreem veel iteraties, en vaak stagnerende processen. Voor dit laatste fenomeen is zelfs een naam bedacht door degenen die het verschijnsel voor het eerst observeerden: *self-limiting behaviour*. Na grondige analyse blijken de problemen goed te beschrijven met een simpel modelprobleem:

$$\exp(40x) - 1 = 0.$$

De oplossing van dit probleem is natuurlijk  $x = 0$ , en het is inderdaad zo dat het niet uitmaakt waar we het startpunt neerleggen voor Newton's methode, in alle gevallen zal er convergentie optreden. Vervelend is wel dat het aantal iteraties sterk afhangt van het startpunt, zoals te zien is in tabel 2.

Met 40 iteraties is in de praktijk nog wel te leven, maar het is duidelijk dat 10 miljoen iteraties een onzinnig groot aantal is. Werk aan de winkel voor de numeriek wiskundige, teneinde de mate van robuustheid van de oplossingsmethode te vergroten. Dit bleek inderdaad mogelijk, door gebruik te maken van niet-lineaire transformaties. Zo werd een nieuwe methode geboren, die *correctietransformatie* is genoemd [3]. En passant bleek het *self-limiting behaviour* ook een eenvoudige verklaring te hebben: afgezien van de laatste paar (kwadratische convergentie!) neemt de fout in iedere iteratie met ongeveer  $1/40$  af.

Startpunt	Aantal iteraties
0.1	10
1	46
-0.1	56
-0.2	2979
-0.3	162748
-0.4	8886100
-0.41	13256508

**Tabel 2** Het aantal iteraties bij het bepalen van het nulpunt van  $\exp(40x) = 1$ .

Dit volgt onmiddellijk uit de formule voor de Newton-correctie.

Ongemerkt zijn we bij de praktijkvoorbeelden aangeland, maar alvorens daar op door te gaan wilde ik graag nog even een stapje terug doen. Ik hoop in het voorgaande een indruk gegeven te hebben van hetgeen numerieke wiskunde inhoudt. Het beeld is echter niet compleet zonder dit vak te plaatsen binnen de omgeving waarin het meestal functioneert. Enerzijds is er de klassieke, pure of zuivere, vorm van numerieke wiskunde. Deze houdt zich onder andere bezig met het benaderen van integralen, met interpolaties, met het oplossen van grote niet-lineaire en lineaire stelsels, en met het oplossen van differentiaalvergelijkingen. De theorie kan hierbij soms zeer abstracte vormen aannemen, zoals onder meer het geval is bij de eindige-elementenmethode en de daarmee geassocieerde functieruimten. De zogenaamde 'Franse school' is hierbij een bekend begrip, wat echter vaak wordt begeleid door een zekere vorm van afgrijzen.

Numerieke wiskunde, of beter: *Scientific Computing*, speelt een hoofdrol binnen het vakgebied Computational Science, ook wel aangeduid met 'de derde discipline'. Het rangwoord 'derde' doet vermoeden dat er minimaal nog twee andere disciplines zijn, inderdaad, hiermee worden 'theorie' en 'experiment' bedoeld. Figuur 3 laat zien dat er tussen deze drie disciplines sterke interacties plaatsvinden.

Van oudsher zijn theorie en experiment natuurlijk nauw met elkaar verbonden: experimentele resultaten leiden uiteindelijk vaak tot een theorie (denk aan de zwaartekrachtwet van Newton), terwijl het ook voorkomt dat op theoretische wijze verkregen resultaten met experimenten worden gestaafd.

Door de opkomst van de computer, het gebruik van software en de ontwikkeling van

numerieke algoritmen is het heden ten dage vaak ook mogelijk om experimenten op een virtuele wijze uit te voeren. Computers en in software verpakte algoritmen fungeren als experimenteertfaciliteiten. Niet voor niets ontstaan er softwarepakketten met namen als *Numlab* (Numeriek Laboratorium) en *Matlab* (Mathematisch Laboratorium).

Virtueel experimenteren heeft een aantal voordelen boven het experiment dat we van oudsher kennen. Zo kan men bijvoorbeeld het gedrag van grootheden in het inwendige van structuren bestuderen, iets wat technisch vaak niet haalbaar is bij traditionele experimenten. Daarnaast is het invoeren van minder gangbare vormen en structuren geen enkel probleem. Ook kunnen materiaaleigenschappen met één druk op de knop worden aangepast. De derde discipline biedt dus meer mogelijkheden, en bij het verwezenlijken hiervan speelt numerieke wiskunde een essentiële rol. Nog niet zo lang geleden is becijferd dat de snelheid van numerieke algoritmen de afgelopen decennia beschreven kan worden met een zelfde wetmatigheid als in de wet van Moore voor de snelheid van computerchips: iedere achttien maanden een factor twee sneller. (Voor computerchips komt er wellicht binnen afzienbare tijd een einde aan deze wetmatigheid. Ironisch genoeg zou dit ook wel eens kunnen gelden voor de snelheid van numerieke algoritmen...) Numerieke wiskunde draagt dus een beduidende steen bij aan de vooruitgang.)

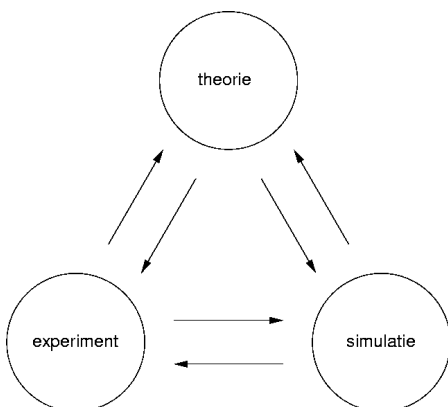
### De wiskundige leest in bedrijf

De derde discipline, waarover ik zojuist sprak, heeft zijn intrede gedaan in de jaren zestig van de vorige eeuw. Sindsdien heeft zij een grote vlucht genomen, en zich mogen verheugen in een toenemende mate van populariteit. Krachtiger wordende computers en snellere algoritmen stelden onderzoekers in staat om virtuele experimenten uit te voeren. Een van de pioniers op dit terrein is Richard Varga, die in zijn beroemde boek [4] beschrijft hoe het gedrag van kernreactoren berekend kan worden. Het aardige van dit boek is dat de auteur zich uitput in het opsommen en bewijzen van eigenschappen van speciale matrices die vooral voor praktijkproblemen van groot belang blijken te zijn. Zo bewijst hij dat een strikt diagonaaldominante *L-matrix* altijd een *M-matrix* is, en zodoende een inverse heeft met louter niet-negatieve elementen. Dit laatste feit blijkt vervolgens samen te hangen met een discreet maximumprincipe, zodat het eindige probleem dus een eigenschap heeft die het oorspronkelijke, vaak in differentiaalver-

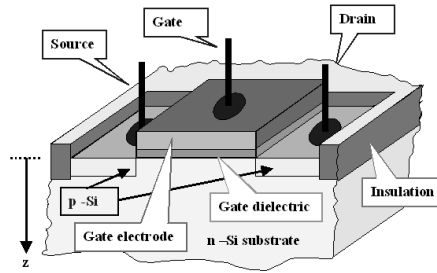
gelijkingen geformuleerde, probleem ook bezit. Dit lijkt een algemeen principe te zijn voor het welslagen van een numerieke methode: zorg er voor dat de numeriek wiskundige formulering de essentiële eigenschappen van het oorspronkelijke probleem overneemt.

In de praktijk blijkt dit principe zeker nog geen gemeengoed te zijn, het is dan ook niet eenvoudig om toe te passen. Op de eerste plaats dient men namelijk een goed model te hebben dat het te simuleren probleem in voldoende mate beschrijft. Modelvorming is uitermate belangrijk, en dient te gebeuren in nauw overleg met onderzoekers uit de betreffende discipline. Mijns inziens geldt namelijk ook hier het principe 'schoenmaker blijf bij je leest'. Persoonlijk laat ik de modelvorming graag over aan natuurkundigen, scheikundigen, mechanisch ingenieurs, et cetera, of aan toegepast wiskundigen. Ik zie de rol van de numeriek wiskundige vooral in het begeleiden van deze modelvorming, hij kan wijzen op artefacten die worden geïntroduceerd door het model, of attenderen op ongewenste eigenschappen van oplossingen.

Om een voorbeeld te geven: voor de simulatie van halfgeleiders (zoals diodes en transistoren, zie figuur 4) wordt meestal gebruik gemaakt van het zogenaamde drift-diffusie model. Dit model, dat is afgeleid uit de Boltzmann transport vergelijking middels een momentenaanpak, blijkt het gedrag van halfgeleiders goed te beschrijven. Althans, mits er adequate modellen worden gebruikt voor de parameters in het model. Een van deze modelparameters is de mobiliteit van elektronen. Voor veel situaties kan men volstaan met een mobiliteitsfunctie die afhangt van het elektrische veld. In de negentiger jaren gingen men echter ook mobiliteitsmodellen gebruiken die afhankelijk waren van de gradiënten van de quasi-Ferminiveaus. Vanuit experimenteel oogpunt was er niets mis met deze



**Figuur 3** Scientific Computing is een van de drie disciplines binnen de Computational Science



**Figuur 4** Een ruimtelijke voorstelling van een halfgeleider.

nieuwe modellen. Er leek een correlatie te zijn tussen de mobiliteit van elektronen en de gradiënt van het quasi-Ferminiveau. Tevens kwamen de gemeten waarden van de mobiliteitsfunctie aardig overeen met waarden berekend met het nieuwe model. Een wiskundige analyse bracht echter naar voren dat met dit model het maximumprincipe werd geschonden, en simulaties gebruikmakend van het model verliepen uitermate moeizaam: Newton-processen convergeerden niet, en het oplossen van de lineaire stelsels bleek een lastige kwestie. Uiteindelijk is, mede door de numeriek wiskundige inzichten, het model bijgesteld op zodanige wijze dat wel garanties konden worden gegeven voor een maximumprincipe.

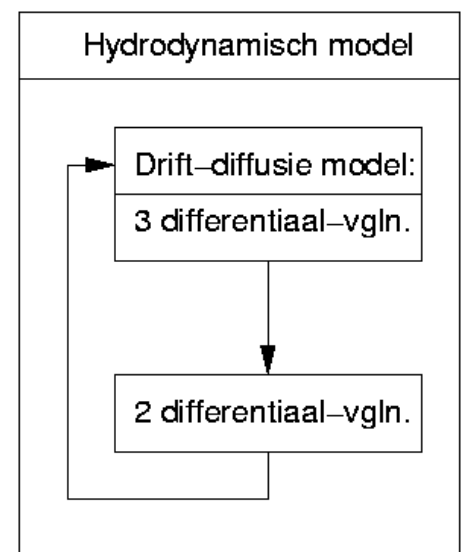
Als de modelvorming eenmaal naar tevredenheid is geschied, vangt het traject voor de numeriek wiskundige pas echt aan. Dit traject kan in twee onderdelen verdeeld worden: het opstellen van het discrete modelprobleem (discretisatie) en het oplossen van het discrete modelprobleem (oplossing).

Voor het selecteren of ontwikkelen van de te gebruiken discretisatiemethoden is het van essentieel belang dat eigenschappen van het model en zijn oplossingen goed in kaart worden gebracht. Na discretisatie liggen namelijk de numerieke benaderingen vast, hieraan wordt door het oplossingsproces niets meer veranderd (afgezien van onnauwkeurigheden die worden geïntroduceerd door het oplossen). Men dient zich hier terdege van bewust te zijn. Dat dit niet altijd het geval is, blijkt uit het volgende voorbeeld. Toen in de negentiger jaren het drift-diffusiemodel niet leek te voldoen voor situaties waarin hete elektronen een rol speelden, raakte het zogenaamde hydrodynamische halfgeleidermodel in gebruik. Dit model is een uitbreiding van het drift-diffusiemodel, met extra differentiaalvergelijkingen voor de temperatuur van elektronen en gaten. Omdat de verschillen tussen oplossingen van het drift-diffusie model en het hydrodynamische model slechts in een beperkt gebied significant waren, gebruikte men een iteratief oplosproces zoals geïllustreerd

in figuur 5.

Op conferenties werd echter veelvuldig gerapporteerd dat de oplosmethode niet convergeerde, en dat moeizaam verkregen oplossingen artefacten vertoonden, zoals negatieve temperaturen. Dat de problemen niet lagen in het oplosproces maar in de discretisatie bleek een boodschap die moeilijk was over te brengen. Men had namelijk de indruk dat, door de ont koppeling van het oplossen van beide onderdelen, de grootheden onderling ook waren ont koppeld. Men raakte pas overtuigd toen een nieuw discretisatieschema voor de extra vergelijkingen het oplosproces sterk vereenvoudigde, en bewijsbaar in alle situaties niet-negatieve temperaturen opleverde. Ook hier lag het discrete maximumprincipe aan de basis van de oplossing.

De voorgaande voorbeelden tonen aan hoe belangrijk het is om er voor te zorgen dat het discrete probleem eigenschappen overneemt van het oorspronkelijke probleem. Hierbij is een zeer nuttige rol weggelegd voor numeriek wiskundigen. Hun toegevoegde waarde ligt in het vermogen om te kunnen abstraheren (zoals het een wiskundige betaamt), naast het hebben van inzicht in het grote aantal methoden dat tegenwoordig beschikbaar is en 'op de plank' ligt. Dit laatste leidt zelfs tot discussies of numeriek wiskundigen zich wellicht overbodig gemaakt hebben, aangezien vrijwel alle bekende algoritmen in software beschikbaar zijn. Waarom zouden onderzoekers uit andere disciplines überhaupt een beroep moeten doen op een numeriek wiskundige, zij kunnen de methoden toch zelf wel aan elkaar knopen door gebruik te maken van die



**Figuur 5** Het hydrodynamische halfgeleidermodel.

software? In een aantal gevallen is dit inderdaad mogelijk, maar ik durf te stellen dat het in de overgrote meerderheid van de gevallen niet mogelijk is. Ieder probleem heeft zijn eigen specifieke eigenschappen, en vergt derhalve een investering aangaande onderzoek naar geschikte algoritmen. Deze investering kan natuurlijk door de onderzoeker zelf gedaan worden, daarbij het terrein van de numericus betredend. Raadzamer is het om, in samenspraak met een numeriek wiskundige, op zoek te gaan naar geschikte combinaties van algoritmen of zelfs nieuwe algoritmen te ontwikkelen indien dit nodig blijkt te zijn.

Dat het soms zelfs gevaarlijk kan zijn om zonder veel voorkennis algoritmen te gebruiken, wil ik illustreren met het volgende voorbeeld. Enige jaren geleden raakte men geïnteresseerd in het gebruik van vloeibare kristal polymeren (zogenaamde LCP's) voor consumentenproducten. Voor het beschrijven van het gedrag van deze materialen was al langere tijd een model bekend, ontwikkeld door de Nobelprijswinnaar Philippe de Gennes [5]. Vanwege de aanzienlijke lengte van de moleculen werden zij in dit model als staafjes voorgesteld, en het probleem is dan om de richting van de staafjes te bepalen.

Een van de eerste testvoorbeelden betrof de stroming van vloeibare kristal polymeren tussen twee platen, waarbij de bovenste plaat met een constante snelheid  $v$  beweegt ten opzichte van de onderste. Voor het meest gangbare materiaal bleek het vrij eenvoudig om dit probleem te simuleren. Het resultaat laat zien dat de hoek van de staafjes (precies in het midden tussen de platen) een monotone functie is van de snelheid.

Problemen traden op toen het materiaal vervangen werd door het materiaal 8CB, dat geheel andere eigenschappen heeft. Voor dit materiaal bleek het niet mogelijk om de curve van het gedrag van de hoek als functie van de snelheid te bepalen. Omdat men hoopte dat een methode genaamd *simulated annealing* wellicht wel tot een oplossing zou leiden, werd deze 'van de plank' gehaald. Inderdaad leidde deze tot oplossingen, maar naarmate de snelheid opliep, bleken oplossingen ook veel moeizamer berekend te kunnen worden. Vanaf een bepaalde snelheid bleek dat het zogenaamde residu (een maat voor het resultaat wanneer men de oplossing substitueert in de vergelijkingen) stagneerde, en niet kleiner wilde worden. Hieruit werd de conclusie getrokken dat men waarschijnlijk de oplossing toch te pakken had.

Toen een rapport over de bevindingen reeds in het eindstadium was, begon men

zich zorgen te maken, omdat de gevonden resultaten niet overeenstemden met hetgeen op fysische gronden verwacht mocht worden. De hulp van een numeriek wiskundige werd ingeroepen, en deze had binnen afzienbare tijd de vinger op de zere plek gelegd. Door de hoek als variabele te gebruiken, en de snelheid als functie hiervan te bepalen, bleek het probleem moeiteloos oplosbaar, zonder gebruik te hoeven maken van simulated annealing. Nu werd ook duidelijk waarom het residu voor hogere snelheden stagneerde: er was voor die snelheden simpelweg geen oplossing meer die in het verlengde lag van de opgebouwde curve. De verklaring hiervoor kon ook gegeven worden na bestudering van de berekende resultaten: de oplossing tussen de platen bleek uit steeds meer lagen te gaan bestaan, waarbij in elke laag de moleculen ongeveer in dezelfde richting (dus hoek) lagen. Dit is een bekend gedrag van LCP's, en verklaart ook de sterkte van deze materialen.

Het voorgaande voorval heeft geleid tot een bloeiende samenwerking tussen fysici en numerici bij de simulatie van vloeibare kristal polymeren. Er zijn diverse gemeenschappelijke publicaties verschenen, en het probleem bleek uitermate interessant en uitdagend vanuit wiskundig oogpunt vanwege de vaak onverwachte fenomenen.

### De wiskundige leest in bedrijf

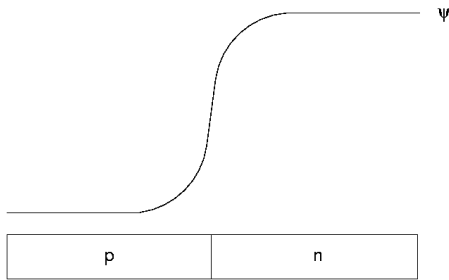
In het voorgaande betoogde ik reeds dat het verstandig is om een numeriek wiskundige in te schakelen bij het construeren van algoritmen voor het simuleren van industriële problemen. Enerzijds heeft ieder probleem zijn eigen specifieke eigenschappen, en het is belangrijk de eigenschappen van het wiskundige model in kaart te brengen en te gebruiken bij het ontwikkelen van geschikte algoritmen. Anderzijds is er tegenwoordig zo'n groot scala aan numerieke oplosmethoden, dat een leek vaak door de bomen het bos niet meer zal kunnen zien. Voldoende redenen om iemand in te schakelen die overweg kan met deze problematiek. En dit bedoel ik ook vrij letterlijk. De samenwerking tussen onderzoekers en numeriek wiskundigen dient dynamisch te zijn, met input van beide kanten. Een hechte samenwerking, met uitwisseling van ideeën en ervaringen. Het is namelijk zeker geen eenrichtingsverkeer. Vaak blijkt dat de uiteindelijk gekozen algoritmen dankbaar gebruik maken van specifieke kenmerken van het probleem.

Een voorbeeld hiervan kwamen we begin jaren '80 tegen toen er een softwarepakket werd geproduceerd dat, voor willekeurige

structuren, stroomloze situaties in halfgeleiders simuleerde. Hiervoor diende een niet-lineaire Poissonvergelijking opgelost te worden. Op zich was dit al een ambitieus streven, in die tijd hechtte men nog weinig geloof aan het kunnen welslagen van zo'n algemeen pakket. Het vergde dan ook veel numeriek wiskundig onderzoek om algoritmen te vinden die bestand waren tegen die algemeenheid, en tegen de extreme niet-lineariteiten. In eerste instantie werd de oplossing gezocht in continueringsmethoden, en werd er lustig gestrooid met de continueringsparameter  $t$ . Bij deze methoden wordt voor  $t=1$  de gewenste oplossing gevonden. Helaas bleek het vaak onmogelijk om bij  $t=1$  te komen, en strandden de oplosprogingen onderweg. Hulp kwam uiteindelijk van de onderzoekers zelf. Zij hadden het voortdurend over een begrip 'ladingsneutraliteit', wat neerkwam op het gelijk aan nul stellen van het niet-lineaire deel van de vergelijking. Gebruikte men de hieruit resulterende (dus: ladingsneutrale) oplossing als beginschatting voor een Newton-proces, dan bleek dit uitstekend te convergeren, zelfs zonder gebruik te hoeven maken van continuering. Hiermee werd de algoritme vele malen simpeler en efficiënter, en tot op vandaag is deze methode in gebruik.

Het aardige is dat deze wijze van het genereren van een beginschatting ook op wiskundige wijze verklaard kan worden. Uit analyses is namelijk bekend dat de niet-lineaire Poissonvergelijking singulier gestoord van aard is. Dit betekent dat er een kleine parameter in het spel is, welke de oplossing in een klein deelgebied snel laat variëren. (Dat deze parameter klein is ten opzichte van de andere grootheden in de vergelijking, blijkt na dimensieloos maken. Dit is een techniek die uitermate belangrijk is voor het verwerken van de nodige inzichten, maar niet altijd meer tot de basisvaardigheden van numerici behoort.) Dit is te zien in figuur 6, waar een oplossing is weergegeven van een eendimensionaal probleem.

Voor dit soort problemen kan men asymptotische expansies genereren, die de vorm hebben van een reeks in de machten van de kleine parameter. De nulde orde term, ook wel gereduceerde oplossing genoemd, blijkt precies overeen te stemmen met de ladingsneutrale oplossing. Daarnaast blijkt dat, met deze oplossing als startpunt, het Newton-proces monotone convergentie vertoont. Al met al is op deze wijze een mooie wiskundige verklaring gevonden voor het succes van de ladingsneutrale startoplossing, geïnitieerd door fysische inzichten. De continueringsme-



**Figuur 6** Een oplossing van een singulier gestoord probleem.

thoden zijn hierdoor voorgoed in de ijskast verdwenen.

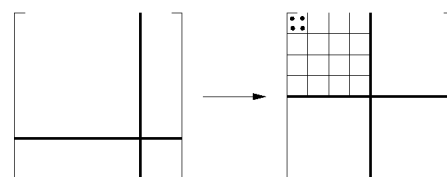
Het voorgaande voorbeeld laat zien dat het uitermate belangrijk is voor numeriek wiskundigen om hun oor te luister te leggen bij collega's uit andere disciplines. Uiteindelijk zal dit vaak tot een *win-winsituatie* leiden: betrouwbare en efficiënte algoritmen voor het uitvoeren van de simulaties van de onderzoeker, en nieuwe inzichten of methoden voor de numeriek wiskundige. In deze zin is het dus goed als de wiskundige zich rekenschap geeft van de achtergronden van een probleem, en daar ook gebruik van maakt. Zijn kennis wordt hierdoor vergroot, het bedrijf fungeert als leer-schouwen en ideeënbank. Of, met een letterlijke vertaling uit het Engels: hij 'leest'.

In een aantal gevallen kan dit 'lezen' zelfs leiden tot nieuwe methoden die algemeen toepasbaar zijn. Bij het simuleren van het gedrag van elektronische schakelingen spelen twee soorten variabelen een rol, namelijk de spanning en de stroom. De lineaire stelsels die uiteindelijk ontstaan na discretisatie van dit probleem zijn indefiniet, hetgeen problematisch is voor het gros van de gangbare oplostechieken. Sterker nog, men is ook momenteel nog zeer actief in het zoeken naar geschikte algoritmen voor het oplossen van indefiniete lineaire stelsels. Voor het onderhavige probleem ontstond op natuurlijke wijze het idee om stromen en spanningen op een bepaalde manier te koppelen, te groeperen in setjes van twee bij elkaar behorende variabelen. Door de lineaire stelsels vervolgens te herordenen (zie figuur 7) en de twee bij twee blokjes als enkele entiteiten op te vatten, bleek een decompositie geconstrueerd te kunnen worden die analoog is aan de bekende Choleski-decompositie voor positief definitie matrices. Het aardige van de methode is dat de indefinietheid volledig wordt geïsoleerd in een blokdiagonaalmatrix. De methode blijkt algemeen toepasbaar op indefiniete stelsels, en is inmiddels in een vergevorderd stadium van ontwikkeling.

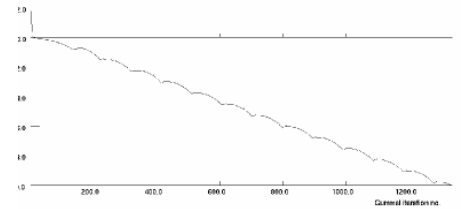
Er zijn vele voorbeelden te geven van sa-

menwerkingen tussen onderzoekers en numeriek wiskundigen, die uiteindelijk leiden tot prachtige resultaten. Soms leiden deze resultaten tot zodanige nieuwe numerieke inzichten dat zij ook bij latere problemen worden gebruikt. Toen wij midden jaren tachtig software ontwikkelden voor het simuleren van het gedrag van halfgeleiders, waren er twee scholen binnen het bedrijf. Wij waren zeer geporteerd van het gebruik van de methode van Newton vanwege haar aantrekkelijke convergentie-eigenschappen en de brede toepasbaarheid qua soorten halfgeleiders. Op het Research Laboratorium in Engeland gebruikte men echter de zogenaamde Gummel-algoritme (in wiskundige taal is dit een blok Gauss-Seidel algoritme), hetgeen neerkomt op het sequentieel oplossen van de drie gediscrètiseerde vergelijkingen. Toepassing van deze algoritme op de voor hen belangrijke problemen (voor ingewijden: MOS transistoren) bleek vele malen snellere simulaties op te leveren. Uiteindelijk konden wij er ook niet onderuit om deze algoritme toe te passen in onze software. Echter, het aardige van de zaak was dat we er een essentiële verbetering in konden aanbrengen. Er was namelijk gebleken dat de Gummel-methode weliswaar convergente processen opleverde, maar dat voor bepaalde situaties het aantal iteraties behoorlijk hoog kon worden. Zie figuur 8 voor een voorbeeld van deze langzame convergentie.

Wat opvalt in figuur 8 is dat de convergentie erg voorspelbaar is, namelijk lineair. Blijkbaar is er een grootste eigenwaarde die een dominante rol speelt in dit proces. We vroegen ons dan ook af of hier gebruik van gemaakt kon worden. Dit bleek het geval: door gebruik te maken van vectorextrapolatie, kon de convergentie zeer aanzienlijk versneld worden. Het toeval wilde dat er in de literatuur juist op dat moment veel aandacht was voor vectorextrapolatie algoritmen. Wij maakten hier dankbaar gebruik van, en zo ontstond een aangepaste versie van Gummels algoritme die vele malen sneller was dan de oorspronkelijke. Later hebben we dit idee van vectorextrapolatie gebruikt bij andere toepas-



**Figuur 7** Voor het zoeken naar geschikte algoritmen voor het oplossen van indefiniete lineaire stelsels wordt het lineaire stelsel op een bijzondere manier gehegroepeerd. Deze hergroepering is geïnspireerd door kennis van electronische schakelingen.



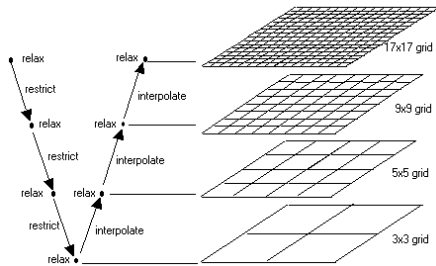
**Figuur 8** Het aantal iteraties bij gebruik van de Gummel-methode voor simulatie van halfgeleidermodellen.

singen, zoals bij het simuleren van de productie van televisiebuizen en bij de koppeling van elektromagnetische velden met halfgeleider-substraten.

**Aansluiting met het bedrijfsleven**

De numericus kan zijn wiskundige ei nog immer goed kwijt binnen het vakgebied van Computational Science, en dus in het bedrijfsleven. Men is er in geslaagd om numerieke methoden de weg te laten vinden naar toepassingen voor lastige praktijkproblemen. Soms vergt dit proces vele jaren, zoals in het geval van de iteratieve oplosmethoden voor lineaire stelsels. Eerst in het laatste decennium van de vorige eeuw werden deze methoden gemeengoed in software, en nog steeds zijn er commercieel beschikbare pakketten die er geen gebruik van maken.

Hier is duidelijk een taak weggelegd voor de numeriek wiskundige. Mijsns inziens is er namelijk een te grote afstand tussen numerici enerzijds en onderzoekers of ontwikkelaars van software anderzijds. Numerieke methoden dienen misschien veel meer te worden gezien als onderdeel van een bedrijfsmatig proces, waarin onderzoek plaats zou moeten vinden met in het achterhoofd de verdere ontwikkeling van het gebruik van dit product. Vaak blijft het op de universiteit bij academische voorbeelden, en wordt de stap naar daadwerkelijke praktijkproblemen niet aangedurfd, of slechts voor de eenvoudigste situaties. Ik wil hier niet beweren dat het numerieke onderzoek in voorkomende gevallen niet nuttig zou zijn of kunnen zijn. Het is de aloude discussie over de toepasbaarheid van wiskundige methoden. In veel gevallen is er gewoonweg veel tijd nodig om het product, in dit geval een numeriek algoritme, te vervolmaken. Het voorbeeld van de iteratieve lineaire oplosmethoden is een succesverhaal. Daarentegen is de meerroostermethode (zie figuur 9) een voorbeeld waarvan men zich kan afvragen wanneer dit product rijp is voor toepassing op gecompliceerde praktijkproblemen. Deze methode wordt al sinds het begin van de tachtiger jaren verder ontwikkeld, en er zijn nog veel vragen te beantwoorden. Op zich is het een prachtige methode, die vast en zeker zal



**Figuur 9** Een schematische voorstelling van de meerroostermethode.

kunnen bijdragen aan het verbeteren van de kwaliteit van hedendaagse simulaties.

Dit geldt in eendere mate voor adaptieve roosterverfijning. Hoewel er in de numeriek wiskundige literatuur veel aandacht aan is besteed in de afgelopen twintig jaar, zien we dat er nagenoeg geen gebruik van wordt gemaakt in software bedoeld voor probleemklassen die belangrijk zijn voor het bedrijfsleven. Weliswaar zijn er pogingen, maar vaak zijn deze niet gebouwd op een gedegen wiskundig fundament. Kenmerkend is ook dat ze vaak semi-adaptief zijn, verfijning vindt vaak plaats op grond van een naburige oplossing. Blijkbaar is het een stap te ver om de methoden verder te ontwikkelen voor deze doeleinden. Naar mijn mening zouden numeriek wiskundigen meer moeite moeten doen om deze aansluiting met het bedrijfsleven voor elkaar te krijgen. Als dit zou lukken, dan wordt de kwaliteit van de simulatieresultaten drastisch verbeterd. Ik zie het dan ook als een van mijn taken om deze kloof te overbruggen en jonge onderzoekers te stimuleren lastige praktijkproblemen op te nemen in hun pakket testvoorbeelden.

Een ander obstakel bij de aansluiting met het bedrijfsleven is de complexiteit van de software. Promovendi testen hun algoritmen meestal binnen omgevingen zoals Matlab, omdat dit hen in staat stelt om snel en efficiënt programmatuur te ontwikkelen. Vaak lukt het om in deze omgeving tests uit te voeren voor een aantal modelproblemen die karakteristiek bezitten van het uiteindelijk op te lossen algemenere probleem. Echter, als het onderzoek eenmaal naar tevredenheid is afgerond en een adequate algoritme is ontwikkeld, komt het probleem van de implementatie in de binnen het bedrijf gebruikte software. Helaas blijkt in de praktijk dat bedrijven vaak niet goed voorbereid zijn op deze taak, en blijft de algoritme uiteindelijk ongebruikt. Deze situatie treedt vooral de laatste jaren veelvuldig op nu bedrijven vaak andere, kortere termijn, prioriteiten hebben. Ik wil hier mijn zorg uiten over deze aansluiting, en

me inzetten voor een verbetering van deze situatie.

### Nieuwe ontwikkelingen

Tot op dit moment heb ik, een enkele uitzondering daargelaten, in deze rede slechts gesproken over algoritmen en software voor individuele componenten of eigenschappen. Dit is ook kenmerkend voor de ontwikkelingen binnen het vakgebied Scientific Computing. Zoals gezegd werd het doen van groot-schalige simulaties mogelijk in de zestiger jaren, en de afgelopen decennia hebben we gezien dat er meer en meer softwarepakketten op de markt kwamen voor verschillende klassen en soorten van problemen. Geavanceerde numerieke methoden zorgen er voor dat de meest gecompliceerde simulaties kunnen worden uitgevoerd.

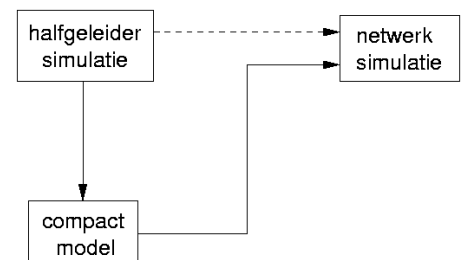
De afgelopen jaren is er een tendens waar te nemen dat men zich niet meer tevreden stelt met de beschikbare software. Er worden steeds hogere eisen gesteld aan producten. Waar men vroeger vaak optimaliseerde met een enkel aspect in het achterhoofd, zo wordt er tegenwoordig geoptimaliseerd met betrekking tot een aantal parameters. Een voorbeeld hiervan is de ontwikkeling van beeldbuizen voor televisies en de bijbehorende maskers, waarbij zowel elektromagnetische als thermische effecten meegenomen dienen te worden. Of bij de ontwikkeling van MRI systemen voor medische toepassingen, waarbij de interactie tussen elektromagnetische en mechanische velden voor ongewenste geluidsproblemen zorgt. Kortom, meer en meer vereisen de praktijkproblemen een samensmelting van afzonderlijke simulatiegereedschappen. Een terminologie die hiervoor ook wel wordt gebezigd is: multifysica.

Helaas is het niet zo eenvoudig om deze gecombineerde berekeningen uit te voeren. Op de eerste plaats zijn de individuele simulaties vaak al erg tijdrovend, zodat het uitvoeren van een reeks berekeningen met verschillende pakketten vrijwel uitgesloten is. Daarnaast zal er vaak een behoorlijke mate van koppeling zijn tussen de verschillende aspecten, hetgeen betekent dat er vele iteraties nodig zijn om de gewenste oplossing te vinden. Voor bepaalde toepassingen worden wel gecombineerde berekeningen uitgevoerd teneinde überhaupt resultaten te verkrijgen, maar het lijkt een weg die uiteindelijk doodloopt.

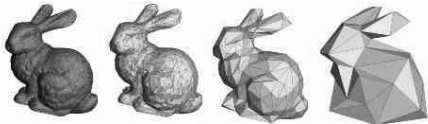
Er zullen dus andere strategieën bedacht dienen te worden, en ideeën hiervoor kunnen we wederom opdoen als we goed kijken naar hetgeen in het bedrijfsleven gebeurt. Binnen de elektronische industrie wordt bij-

voorbeeld al vele jaren gewerkt met compacte modellen voor de beschrijving van transistoren, welke vervolgens worden gebruikt in simulaties van grote elektrische netwerken. In wezen voert men op deze wijze gecombineerde berekeningen uit. Het aardige is dat het gedrag van de individuele transistoren beschreven wordt met slechts een klein aantal parameters. Met andere woorden: in plaats van de tijdrovende berekeningen met behulp van software voor halfgeleidersimulatie rechtstreeks te koppelen met software voor netwerksimulatie, wordt een tussenstap uitgevoerd. In deze tussenstap wordt zeer nauwgezet het gedrag van de individuele transistoren bekeken, en uiteindelijk samengevat in compacte modellen. Deze compacte modellen worden verpakt in een stukje software dat verwaarloosbaar weinig tijd kost in vergelijking met een halfgeleidersimulatie, en deze software wordt gekoppeld met de netwerksimulatie. De uiteindelijke gecombineerde berekening zal dan vergelijkbare rekentijd vergen als een enkele netwerksimulatie. In figuur 10 is deze werkwijze schematisch weergegeven.

Nu zullen experts op dit terrein onmiddellijk roepen dat de tussenstap, die uiteindelijk leidt tot het compacte model, louter gebruik maakt van experimentele resultaten. Dit is ook inderdaad de werkwijze zoals die tot nog toe wordt gebezigd. Echter, het is duidelijk dat gemeten resultaten evenzogoed vervangen kunnen worden door resultaten van simulaties. Men zou zelfs kunnen denken aan het combineren van simulaties en metingen, om zodoende een zo accuraat mogelijk compact model te kunnen construeren. Bovendien is dit een discussie die voor mijn betoog geen gevolgen heeft. Het gaat namelijk om het idee van de tussenstap. Door een of meerdere aspecten van gedrag samen te vatten in een model met slechts een beperkt aantal parameters, zullen gecombineerde berekeningen veel minder tijdrovend zijn. Kortom, het ge-



**Figuur 10** Halfgeleidersimulaties worden nu ook uitgevoerd door het invoegen van een extra tussenstap, het *compact model* waar het fysische gedrag van enkele transistoren wordt gemodelleerd. Dit compact model is op experimentele resultaten gebaseerd.



**Figuur 11** Hoe kunnen we een model met een groot aantal parameters reduceren tot een model met slechts een klein aantal parameters? (illustratie: [http://people.deas.harvard.edu/~xgu/paper/Silhouette.Map/silhouette\\_simp.html](http://people.deas.harvard.edu/~xgu/paper/Silhouette.Map/silhouette_simp.html))

bruik van compacte modellen lijkt een goede oplossing voor onze problematiek.

Het construeren van compacte halfgeleidermodellen is een vak apart, waarover vele boeken en artikelen zijn verschenen. De modellen zijn vaak erg ingewikkeld, bovendien is er een hiërarchie van modellen ontstaan welke is ingegeven door de historische gang van zaken. Het kopiëren van deze aanpak in een algemenere context lijkt daarom niet voor de hand te liggen, het is allemaal erg specifiek. Bovendien wordt voor de constructie van de modellen nog veel werk handmatig verricht, terwijl ons streven juist is om modellen automatisch te kunnen genereren. Het lijkt daarom beter om de essentiële kenmerken te isoleren en te gebruiken voor een algemene aanpak.

De algemenere aanpak wordt met een Engelse term aangeduid: *reduced order modelling*, afgekort ROM. Een letterlijke vertaling hiervan geeft de essentie van de methode aan: het modelleren met een model van lagere orde. Dit klinkt abstract, is echter eenvoudig te verklaren. Immers, indien men een simulatie uitvoert, dan hangt de oplossing af van een groot aantal parameters: parameters in de gebruikte fysische modellen, afmetingen, tijdstippen, numerieke parameters, et cetera. Dit kunnen duizenden, tienduizenden of zelfs miljoenen parameters zijn. Kan men de oplossing formuleren in termen van veel minder parameters, dan heeft men automatisch een model van lagere orde.

Op het alomtegenwoordige internet vond ik enige aardige illustraties, die meteen de essentie duidelijk maken van hetgeen reduced order modelling inhoudt. Kijkt u eens naar het volgende rijtje plaatjes (figuur 11).

Van links naar rechts worden steeds meer details weggelaten. Echter, zou men alleen het laatste plaatje bekijken, dan nog is duidelijk dat het hier om een voorstelling van een konijn handelt.

De cruciale vraag is natuurlijk: hoe kunnen we een model met een groot aantal parameters reduceren tot een model met slechts een klein aantal parameters?

Naar een antwoord op deze vraag is de afgelopen jaren uitgebreid onderzoek gedaan

door numeriek wiskundigen. Een zeer kansrijke aanpak maakt gebruik van projecties op deelruimten. Deze deelruimten worden op iteratieve wijze gegenereerd (meestal via het bekende Krylov proces), waarbij de grootste eigenwaarden van het probleem feitelijk worden geïsoleerd. Dit verklaart ook meteen waarom zo'n aanpak succesvol kan zijn: er wordt enkel gekeken naar het dominante gedrag van oplossingen, details in het gedrag worden verwaarloosd.

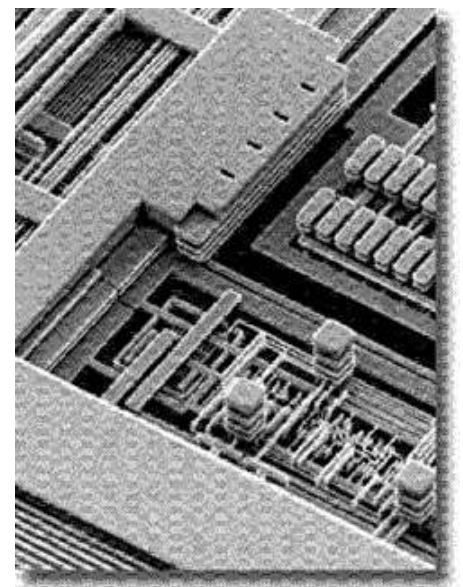
De resulterende methoden voor het construeren van compacte modellen leunen zwaar op de numerieke wiskunde die zich bezighoudt met het iteratief oplossen van lineaire stelsels. Krylov methoden, geconjugeerde gradiënten, deelruimtes, eigenwaarden, het zijn allemaal begrippen die een essentiële rol spelen binnen dit relatief nieuwe vakgebied. Aardig is tevens dat er een duidelijk verband bestaat met het vakgebied van de meet- en regeltechniek. Begrippen als observeerbaarheid en controleerbaarheid komen op natuurlijke wijze naar voren, en in deze zin is het raadzaam om samen te werken met de collega's van meet- en regeltechniek.

Reduced order modelling mag zich verheugen in een snel groeiende belangstelling, zowel vanuit de universiteiten als vanuit bedrijven. Middels het Europese wiskundenetwerk MACSInet [6] organiseren we op regelmatige basis symposia over dit onderwerp. Inmiddels zijn in deze bijeenkomsten vele toepassingen de revue gepasseerd, waarbij tevens duidelijk is geworden dat er grote behoefte bestaat aan betrouwbare constructieve methoden.

Een van de gebieden waarin erg veel onderzoek wordt gedaan naar reduced order modelling is het vakgebied waarin ik gedurende enige jaren werkzaam ben: het ontwerp van analoge en digitale schakelingen. Zoals bekend worden chips almaar kleiner, en ze lijken gedichteerd te worden door de al eerder ter sprake gekomen wet van Moore. Karakteristieke afmetingen worden kleiner, en de frequenties waarbij de schakelingen opereren worden hoger. Tezamen zorgt dit ervoor dat zeer dicht bij elkaar gelegen onderdelen steeds duidelijker invloed van elkaar ondervinden. Soms kan dit een hinderlijke en zelfs ongewenste invloed zijn. Aangezien ontwerpen tegenwoordig liefst dienen te voldoen aan het dictaat van 'first time right', zijn er krachtige virtuele ontwerpomgevingen gecreëerd waarmee het gedrag van deze enorm omvangrijke schakelingen onderzocht kan worden. Graag zou men binnen deze ontwerpomgeving ook de mogelijke nega-

tieve invloedseffecten simuleren. Dit is echter tot op heden niet of slechts in zeer beperkte mate mogelijk. Vandaar dat wij onderzoek zijn gestart naar methoden voor het efficiënt berekenen van deze effecten. Hiertoe worden structuren onderzocht als weergegeven in figuur 12.

Deze zogenaamde interconnect structuren bestaan uit een aantal verschillende lagen, met daarin onder andere verbindingen van metaal die zorgen voor het transport van de elektrische signalen tussen de vele elektronische componenten. Om eventuele ongewenste effecten te kunnen detecteren, dient het elektromagnetische gedrag van deze interconnect structuren nauwkeurig bepaald te worden. Dit gebeurt via het numeriek oplossen van de Maxwellvergelijkingen, hetgeen een rekenintensieve exercitie is vanwege het driedimensionale karakter en het grote aantal variabelen dat dit met zich meebrengt. Men kan echter aanvoelen dat deze miljoenen parameters zeker niet nodig zijn voor een analyse van de ongewenste effecten. Immers, tot voor kort waren de afmetingen zodanig dat er geen ongewenste effecten optraden. Kortom: er is gerede hoop dat de resultaten van de driedimensionale simulaties samengevat kunnen worden in een model van drastisch gereduceerde orde. Momenteel vindt er veel onderzoek plaats naar geschikte methoden om modellen van gereduceerde orde te construeren voor genoemde toepassing. Hierbij treden allerlei problemen op. De initieel gangbare methode genaamd AWE (asymptotic waveform evaluation) blijkt voor ordes hoger dan 8 geen



**Figuur 12** Geïntegreerde circuits worden steeds kleiner en werken met steeds hogere frequentie.



geschikte modellen op te leveren. PVL, een bijzonder slimme herformulering van AWE welke gebruikmaakt van het Lanczosproces voor het vinden van eigenwaarden, won in de jaren negentig snel terrein. Tot men constateerde dat PVL enige essentiële eigenschappen van het oorspronkelijke probleem niet behoudt. Dit heeft het onderzoek geïnitieerd naar methoden welke de zogenaamde passiviteit behouden. Inmiddels zijn er een aantal voorstellen in deze richting gedaan, maar is ook een nieuwe eis toegevoegd aan het wensenlijstje: causaliteit. Kortom: het onderzoeksterrein ligt nog voor een groot gedeelte braak, doch wordt langzaam maar zeker ontgonnen door numerici in nauwe samenwerking met onderzoekers en ontwerpers uit de elektronische industrie.

#### Onderzoekers uit andere disciplines

Ik hoop dat ik u enige kijk heb kunnen geven op de methodes en werkwijze die gepaard gaan met het bedrijven van numerieke wiskunde voor industriële problemen. Ik ben erg blij om in zo'n boeiend gebied te kunnen en mogen werken. Mijns inziens is de combina-

tie van een interessante en veelzijdige baan in het bedrijfsleven met een uitdagende taak aan deze universiteit ideaal. Op deze wijze ontstaat tweerichtingsverkeer. De ervaringen, opgedaan in het bedrijfsleven, kunnen doorgegeven worden aan jonge onderzoekers die, op hun beurt, nieuwe methoden ontwikkelen om er uiteindelijk weer lastige praktijkproblemen mee op te kunnen lossen. En zo is de cirkel rond.

Ik hoop tevens dat ik u heb kunnen overtuigen van het belang van het vakgebied Numerieke wiskunde voor de industrie. Het is een vak met veel facetten, en het beoefenen ervan vereist een gedegen kennis van beschikbare methoden en hun eigenschappen. De beschikbaarheid van grote hoeveelheden numeriek wiskundige software doet vermoeden dat het vak beoefend zou kunnen worden door eenieder. Het is echter zeer aan te raden gebruik te maken van de diensten van een numericus. Niet alleen vanwege zijn kennis van de methoden, maar ook vanwege zijn vermogen tot abstractie en generalisatie. De numeriek wiskundige zal het wezenlijke en diepere van het praktijkprobleem grondig analyse-

ren, volgens zekere regels. Hierdoor kan vaak meteen een grote klasse van problemen beschreven en aangepakt worden.

In de rede heb ik ook aangegeven dat de numeriek wiskundige veel kan leren van het werken met echte praktijkproblemen. Enerzijds kan men zich niet tevredenstellen met het ontwikkelen van methoden voor simpele modelproblemen, het praktijkprobleem vergt doorgaans veel meer diepgang. Dit komt ten goede aan de methoden, zij zullen hierdoor robuuster worden en algemener toepasbaar. Anderzijds dient men dankbaar gebruik te maken van de inzichten van onderzoekers, die vaak verrassende suggesties hebben voor de te ontwikkelen numerieke methoden. Numeriek wiskundigen die werkzaam zijn in of voor een bedrijf dienen zich bij voorkeur niet eenzaam terug te trekken in hun kamer, doch actief contact te onderhouden met onderzoekers uit andere disciplines. Een hechte samenwerking zal uiteindelijk leiden tot de beste resultaten, zowel vanuit bedrijfsmatig als numeriek wiskundig oogpunt. ◀

#### Noten en referenties

- 1 G.H. Hardy, *A Mathematician's Apology*, Cambridge University Press (1940)
- 2 J.M. Borwein and P.B. Borwein, *Pi and the AGM*, John Wiley & Sons (1998)
- 3 S.J. Polak, C. den Heijer, W.H.A. Schilders, and P.A. Markowich, *Semiconductor device modeling from the numerical point of view*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, volume 24, pagina's 763-838 (1987)
- 4 R.S. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, Prentice Hall (1962)
- 5 P.G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals - 2*, Clarendon (1995)
- 6 <http://www.macsinet.org/>