

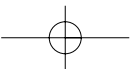
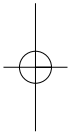
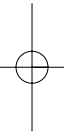


Universiteit Twente
de ondernemende universiteit



Wiskunde in het groot en in het klein

door Prof. dr. ir. Bernard J. Geurts



Wiskunde in het groot en in het klein

Rede uitgesproken bij het aanvaarden van
het ambt van hoogleraar

Multiscale Modeling and Simulation

aan de Faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica
van de Universiteit Twente
op donderdag 29 maart 2007

door:
Prof.dr.ir. Bernard J. Geurts

Inleiding

Mijnheer de Rector Magnificus, Dames en Heren,

Het is niet genoeg om te weten, men moet het ook kunnen toepassen.

Ik wil deze woorden van Goethe graag gebruiken als motto voor mijn oratie. Hierin hoop ik iets van mijn fascinatie voor mijn vakgebied aan u over te brengen.

Wat is mijn vakgebied dan zult u zich misschien afvragen. Heel kort samengevat bestudeer ik stromingen uit natuur en techniek met wiskundige modellen. Stromingsleer is een oud en omvangrijk vakgebied. U herkent het allemaal; in het ruisen van de wind door de bomen of in het opspattende water bij een duik in een zwembad. Maar ook op een veel kleinere schaal hebt u met stromingen te maken, bijvoorbeeld als u in uw kopje koffie of thee roert, of wanneer u uw pols krachtig voelt kloppen na een korte sprint. Dit onderzoeksveld heeft een sterke aantrekkingskracht voor toegepast wiskundigen; uit wetenschappelijke nieuwsgierigheid naar complexe niet-lineaire verschijnselen, maar ook door de talloze concrete toepassingen van stromingen waar wiskundige modellering aan de basis ligt. Van enkele van mijn zoektochten en plannen voor de toekomst wil ik u wat meer vertellen in deze voordracht.

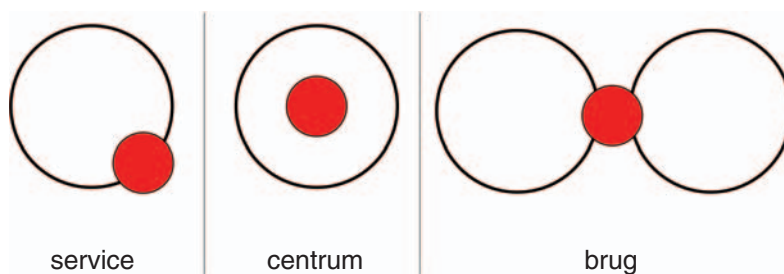
Wiskunde en wiskundigen hebben in de regel een niet al te best imago bij een breed publiek. Het blijft voor velen tamelijk ongrijpbaar wat je nou 'eigenlijk' met die wiskunde kunt doen. Bovendien wordt het vaak als ingewikkeld gezien. Het zou mooi zijn als ik dat imago in één keer helemaal zou kunnen verbeteren, maar ik weet dat me dat niet zal lukken. Wat ik wel wil proberen uit te leggen is wat mij beweegt in mijn werk en hoe dat gekoppeld is aan onderzoek uit andere disciplines. Ik hoop dat u dat zal helpen bij de vraag wat ik 'eigenlijk' doe en u wat milder zal stemmen over wiskunde en wiskundigen.

Gezien met de ogen van een wiskundige doet het er niet zo toe aan welke concrete stromingen ik werk. Om trouw te blijven aan mijn eigen motto, heb ik echter gekozen om me te concentreren op twee zeer uiteenlopende stromingsregimes. Aan de éne kant bestudeer ik grootschalige turbulente stromingen zoals bijvoorbeeld in oceanen en in de atmosfeer optreden. Aan de andere kant richt ik mij op uiterst kleinschalige verschijnselen zoals in

complexe vloeistoffen voorkomen, of in de kleinere bloedvaten van ons lichaam, of zelfs verschijnselen in het inwendige van biologische cellen. Tenslotte bestudeer ik de problemen die ontstaan wanneer men deze twee verschillende werelden in één enkel computermodel wil verenigen.

Als de stromingsverschijnselen er niet zo toe doen, waar gaat het mij dan wel om? Om die vraag te beantwoorden wil ik een onderscheid maken tussen 'wiskunde gebruiken' en 'toegepaste wiskunde'. In steeds meer technisch onderzoek worden wiskundige hulpmiddelen gebruikt, vaak in de vorm van uitgebreide softwarepakketten. Dit onderzoek kenmerkt zich vooral door de nadruk op de concrete toepassing of het concrete verschijnsel. Bij toegepaste wiskunde is het doel echter anders. In plaats van de concrete problematiek van een vakgebied, gaat de aandacht uit naar het ontdekken van structuren, verbindingen en verwantschappen binnen een groep van totaal verschillend lijkende problemen. Hiervoor is het wat ongreepbare fenomeen van 'wiskundige abstractie' noodzakelijk. Daarmee kan een toegepast wiskundige tegelijkertijd een rol spelen in uiteenlopende multidisciplinaire teams. Niet omdat die wiskundige zo slim is, maar omdat het tot het wezen van zijn werk behoort.

Een toegepast wiskundige kan zijn vak op een aantal manieren uitoefenen, zoals ik in figuur 1 heb geschetst. In het 'service' model is de rol van de wis-



Figuur 1: Verschillende manieren om toegepaste wiskunde in een multidisciplinaire omgeving vorm te geven.

kundige vooral dienend aan het concrete probleem en wordt de al aanwezige wiskundige expertise ingezet. Het 'centrum' model vraagt van een toegepast wiskundige om al bij de geboorte van een onderzoek betrokken te raken bij de formulering van de doelen en de centrale vragen. Het 'brug' model, tenslotte, staat een toegepast wiskundige toe om het geleerde in het ene veld te vertalen in de taal van het andere veld. Dit vereist een voldoende mate van wiskundige abstractie om, zoals dat heet, 'door het probleem heen' te kunnen kijken en te weten wat de wiskundige structuren zijn die in beide problemen voorkomen. Ik wil niet kiezen voor één van deze drie modellen als het 'beste' voor een toegepast wiskundige. Vaak werk ik aan diverse problemen gelijktijdig en verandert bovendien de mate van betrokkenheid in de loop van een onderzoek. De wiskundige inhoud heeft dan een bijpassende dynamiek die meer of minder gebaat is bij het éne of het andere model.

Maar kan een toegepast wiskundige dan wel zo makkelijk 'switchen' en in betrekkelijke afzondering en met weinig specifiek commitment werken? Met andere woorden 'Does the subject matter?', ofwel, 'Doet het onderwerp er toe?'. Het is de titel van een schilderij van Sir Alfred Munnings (figuur 2) waarop een aantal mensen te zien is dat een beeldhouwwerk bewondert. Klaarblijkelijk denkt ieder er het zijne of het hare van. Deze kritiek op 'Kunst om de Kunst' heeft zijn analogon in 'Wiskunde om de Wiskunde'. Veel zuiver wiskundigen en ook menig toegepast wiskundige zal deze vorm van wiskunde te vuur en te zwaard willen verdedigen. Ik vind het echter niet van toepassing op mijn eigen werk en sluit me graag aan bij de woorden van René Descartes:



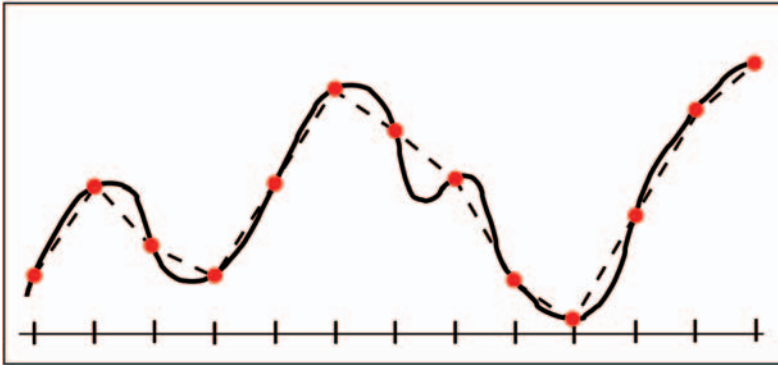
Figuur 2: 'Does the subject matter?' door Sir Alfred Munnings.

Elk probleem dat ik oploste werd een regel waarmee ik later andere problemen kon oplossen. Dit is voor mij de basis van 'wiskundige abstractie'. De vraag 'Does the subject matter?' kan door een toegepast wiskundige dan ook niet met 'nee' worden beantwoord. De scheidslijn of iets dan wel-of-niet toegepaste wiskunde is, is niet erg goed bepaald. Sterker nog, het heeft voordelen om deze grensstreek tussen wiskunde en toepassing veelvuldig te doorkruisen. Van mijn tochten in dit gebied wil ik in de rest van mijn voordracht een aantal aspecten nader belichten.

Ik wil beginnen met een belangrijke 'grondstof' voor mijn werk - het modelleren met computers. Daarna zal ik laten zien hoe ik met deze computermodellen de fantastische complexiteit van turbulente stromingen probeer te begrijpen en te voorspellen. Naast stromingen op grote schaal besteed ik veel aandacht aan processen op microscopische schalen. Hierbij spelen geheel andere fysische, chemische en biologische mechanismen een hoofdrol. Die zijn van belang bij allerlei fascinerende toepassingen die tegenwoordig in de belangstelling staan, met name gericht op miniaturisatie - dus gericht op sneller, kleiner, beter, slimmer. Hier zal ik later nog op terugkomen.

Modelleren met computers

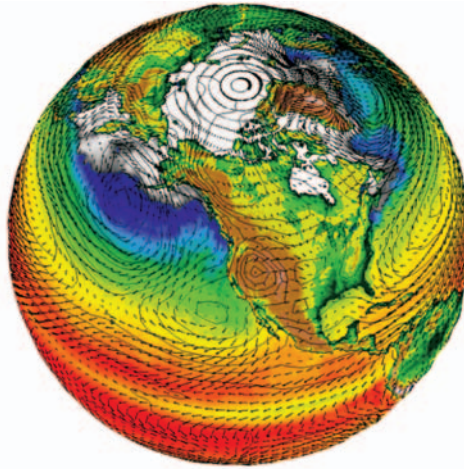
De ontwikkeling van een betrouwbare computersimulatie is een hoofddoel van veel toegepast onderzoek. Zo'n simulatie kan inzicht geven in complex gedrag in systemen waar experimenten onvolledig zijn, of niet goed mogelijk zijn, of misschien wel te gevaarlijk. Zo'n simulatie omgeving kan ook dienen om de invloed van afzonderlijke mechanismen los van elkaar te bestuderen. Men kan hiermee ook mogelijke scenario's naast elkaar zetten of processen optimaliseren, bijvoorbeeld wat betreft het gebruik van grondstoffen en energie. Deze computersimulaties zijn in vele opzichten vergelijkbaar met fysische experimenten. Om ze te bouwen is niet alleen kennis van programmeren en datamanagement noodzakelijk maar moet men ook concepten en hulpmiddelen opbouwen om grote softwaresystemen te construeren, te testen en te laten groeien. Dit is tegenwoordig van net zo'n centraal belang, als wiskundige analyse en algebra dat al eeuwen waren.



Figuur 3: Discretisatie van een continue lijn in een aantal punten, verbonden door rechte lijnstukjes.

Bij de bestudering van stromingsverschijnselen met computermodellen loop je meteen tegen een belangrijk probleem op. Een computer is goed in het zetten van 'stapjes'. Een computer kent 'r' of 'o' en niets daar tussenin. Echter, vrijwel alle fysische modellen in de stromingsmechanica zijn continu in de plaats en/of in de tijd. In deze modellen is er altijd wel een tijdstip te kiezen tussen twee andere tijdstippen, of een locatie tussen twee andere locaties. Om toch in staat te zijn om continuüm modellen in een computer te simuleren moet men deze modellen 'discretiseren', zoals dat heet. Als voorbeeld heb ik in figuur 3 aangegeven hoe een continue lijn benaderd kan worden met een collectie korte rechte lijnstukjes. Als de continue lijn glad verloopt en ik meer en tegelijkertijd kortere lijnstukjes toe sta, dan kan ik de benadering steeds nauwkeuriger maken. Op basis van dergelijke benaderingsprincipes ontstaat de mogelijkheid om de fysische situatie te beschrijven in een vorm waar een computer wat mee kan. Het verloop van een stroming kan dan bijvoorbeeld worden benaderd door een enorm groot aantal erg kleine stapjes in de plaats en in de tijd te zetten.

Het benaderen van punten op een lijn is natuurlijk niet genoeg om realistische problemen mee te modelleren. Daarvoor is in de regel een uitbreiding naar drie dimensies noodzakelijk. Bovendien kun je je afvragen of het gebruik van rechte lijnstukjes wel zo optimaal is, of, wat je zou moeten doen wanneer de oplossing in de tijd verandert. Dit soort vragen en overwegingen horen bij de numerieke wiskunde waar veel van mijn dagelijkse werk aan gewijd is.



Figuur 4: Weergave van stroming, temperatuur en ijsverdeling in een computermodel van de aarde.

Na een geschikte discretisatie is het mogelijk om voorspellingen te doen van het gedrag van allerlei systemen, soms gericht op vragen met een directe maatschappelijke relevantie. Een voorbeeld is opgenomen in figuur 4 waar enkele grote oceaanstromingen, de watertemperatuur en de zee-ijs concentratie te zien zijn. Aan deze problemen heb ik in de afgelopen jaren met collega's uit Los Alamos gewerkt. Ik wil hier in het bijzonder Darryl Holm noemen. De pijltjes geven de locale stroomrichting weer. Omdat het aardoppervlak in zeer veel 'rekencellen' is onderverdeeld kunnen allerlei details worden weergegeven. U ziet hier ook dat computers niet alleen gebruikt worden voor het genereren van oplossingen, maar minstens zo belangrijk zijn voor het structureren van de verkregen informatie. Eigenschappen van stromingen kunnen goed worden gevisualiseerd en bewerkt om tot een passende interpretatie te komen.

Als de overgang van 'continu' naar 'discreet' niet goed gebeurt dan kan dit belangrijke fouten introduceren in het computermodel. Een leidraad hierbij is om bij de constructie van discretisatieschema's fysische basisprincipes zo expliciet mogelijk te verwerken. Een mooi herkenbaar voorbeeld hiervan is de eigenschap dat massa een zogenaamde behouden grootheid is. Dit zult u allen

direct herkennen; materie kan niet zomaar spontaan ontstaan of verdwijnen. Met andere woorden, de massa in een deel van een stromingsdomein kan alleen veranderen als gevolg van instroom of uitstroom aan de randen. Vergelijkbare eisen kan men formuleren voor impuls en energie in niet-viskeuze stromingen. In algemene situaties worden deze eigenschappen door zogenaamde eindige volume of eindige elementen discretisaties intact gelaten. Andere benaderingsmethoden hebben deze eigenschap óf alleen bij benadering, óf alleen onder bepaalde condities. Hierdoor zijn ze in de regel een stuk minder geschikt. Een elegant voorbeeld van een eindige volume discretisatie is de zogenaamde scheefsymmetrische discretisatie van de convectieve termen, waaraan door collega's in Groningen wordt gewerkt. Door aan de scheefsymmetrie vast te houden, zelfs tegen inlevering van iets van de formele orde van nauwkeurigheid van het schema, wordt het mogelijk om stabiele simulaties ook bij grove resoluties voor elkaar te krijgen. De uitbreiding van deze aanpak naar complexe situaties vormt een belangrijke uitdaging in de nabije toekomst.

Vaak wordt men geconfronteerd met een combinatie van onzekerheden in een computermodel. Zowel de numerieke behandeling als sommige onderdelen van het continuüm model kunnen aanzienlijke beperkingen met zich meebrengen. Bovendien kan de beschikbare rekenkracht een sterke belemmering zijn voor de mate van detaillering van een numerieke oplossing. Onder deze omstandigheden kunnen de diverse foutbronnen een belangrijke verstoringe invloed hebben en bovendien elkaar onderling versterken. Het is dan van belang om vanuit kennis van de wiskundige eigenschappen van het model en de fysische principes die er aan ten grondslag liggen te beoordelen wat de kwaliteit van een gegeven computermodel is. Aan de studie van de dynamische effecten van deze onvermijdelijke fouten heb ik in de afgelopen jaren met plezier gewerkt met collega's uit Leuven en Parijs waar ik Johan Meyers en Pierre Sagaut expliciet van wil noemen.

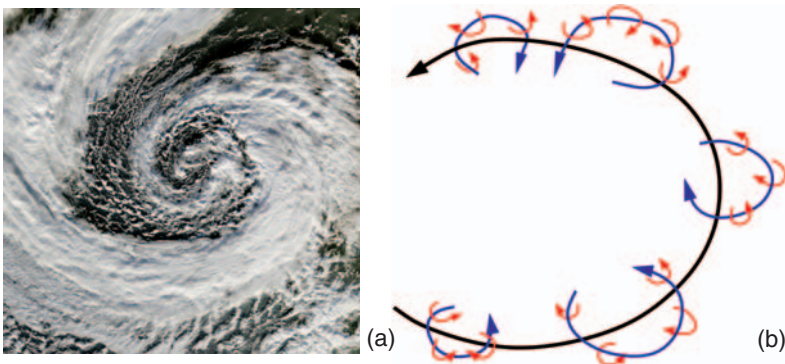
Voor iemand die aan stromingen op 'grote' en op 'kleine' schalen werkt is een logische volgende vraag welke problemen moeten worden overwonnen wanneer men deze werelden in één enkel computermodel wil combineren. De koppeling van een diversiteit aan modellen moet natuurlijk recht blijven doen aan de natuurkundige basisprincipes die als uitgangspunt dienden. Nou zijn de dominante mechanismen in grote systemen niet hetzelfde als die in kleine systemen. Het gevaar bestaat daarmee dat er een bonte lappendeken aan aannames, empirische kennis en specifieke deelmodellen wordt ver-

zameld in de hoop dat deze onderdelen elkaar niet zullen 'bijten' wanneer ze in een omvattender model worden samengevoegd. Ik ben echter van mening dat in voldoende complexe situaties elke ad hoc aanpak gedoemd is om vroeger of later, en op een tamelijk essentiële manier te falen. Hier zijn met gemak allerlei voorbeelden van te noemen. Omdat ons leven meer en meer vervlochten raakt met steeds complexere systemen is het van belang om methodes te ontwikkelen waarmee die complexiteit op een betrouwbare manier kan worden begrepen in termen van de grondleggende natuurwetten. Mijn antwoord is in de vorm van consistente 'multiscale' modellering en simulatie, waarin wiskundige abstractie en concrete modelstudies hoofdingrediënten zijn. Ik wil dat graag illustreren aan de hand van turbulente stromingen.

Wiskunde en turbulentie

Turbulentie kent u állemaal wel in de vorm van een onrustige vlucht met een vliegtuig, of het suizen van de wind in uw oren wanneer u tegen de wind in fietst of loopt. Turbulentie is een stromingsverschijnsel waarbij structuren van allerlei groottes tegelijkertijd voorkomen. Kijkend naar zo'n turbulente stroming zullen de grotere structuren direct opvallen. Deze bevatten het grootste deel van de energie en zijn typisch voor de concrete stroming waar u mee te maken hebt. Mooie voorbeelden zijn de satellietopnames die de dagelijkse weerpraatjes illustreren. De grote gekromde wolkenpatronen die bij een stevige depressie horen vallen dan meteen op. Echter, die wolkenformaties zijn niet netjes glad. Als men wat beter kijkt dan vallen allerlei kleinere variaties op. Dit is mooi te zien in figuur 5(a).

Een scala aan structuren van verschillende groottes betekent ook een scala aan tijdschalen. Grote structuren zullen voor geruime tijd globaal hun vorm behouden. Ze zijn behoorlijk coherent, wat we bijvoorbeeld kennen als dagenlange periodes met mooi weer of met grijs weer. Naarmate de structuren kleiner zijn, zullen ze ook korter blijven bestaan. Dit geeft een totaalbeeld waarbij tal van levendige kleinere structuren worden meegeveegd op de flanken van grotere structuren, die op hun beurt worden meegeveegd in de beweging van nog grotere structuren. Dit type transport heet 'convectief'. Deze complexe draaierigheid is geschetst in figuur 5(b). Veel mooiere tekeningen zijn al eeuwen geleden door Leonardo Da Vinci gemaakt. Dit illustreert ook de lange geschiedenis van studie naar dit intrigerende fenomeen.



Figuur 5: (a) Voorbeeld van een cycloon nabij IJsland (*earthobservatory.nasa.gov*)
 (b) illustratie van een collectie wervels.

De bouwsteen in deze schets is een zogenaamde 'vortex' - een gebiedje in de stroming waarin een tijd lang een samenhangende ronddraaiende beweging plaatsvindt, een soort draaikolk zoals soms in het wateroppervlak achter brugpijlers in een rivier te zien is. In de tekening is alleen een schets in twee dimensies gegeven - natuurlijk is een vortex iets met drie dimensies. Voor het gemak kunt u denken aan een flexibel, tijdelijk bestaand buisje met wervelende beweging, of een vloeistofbeweging die meer weg heeft van een ronddraaiende pannenkoek. Een turbulente stroming bestaat uit een grote collectie van dergelijke vortices, die bovendien komen en gaan in allerlei tempo's die samenhangen met hun eigen groottes. De interacties tussen wervelingen van verschillende groottes vormen de basis voor de complexiteit van turbulentie.

Een turbulente stroming wordt gevoed door energie toe te voeren aan de grotere schalen, bijvoorbeeld door te roeren. Uit de interacties tussen stromingsdetails met verschillende groottes ontstaan ook meer gelokaliseerde vloeistofbewegingen. Dit is een niet-lineair proces. Gemiddeld gezien stroomt hierdoor energie van de grote schalen naar de kleinere structuren. Dit proces staat bekend als de 'energiecascade' die door de Engelse geleerde Richardson (1920) en later door de Russische geleerde Kolmogorov (1941) naar voren is gebracht. Het verhaal is echter nog niet af. Als je ergens energie in stopt, en vervolgens alleen zegt hoe die energie zich verdeelt over kleinere structuren dan zou

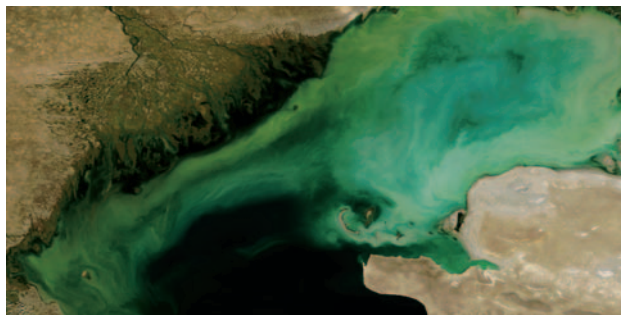
gaandeweg steeds meer energie in de stroming aanwezig zijn. Lang genoeg roeren in een kopje koffie zou onverwachte effecten hebben. Er is echter ook een mechanisme dat energie onttrekt aan een stroming. Dit staat bekend als dissipatie, een soort interne wrijving. Dit mechanisme werkt vooral op voldoende kleine structuren en zorgt voor warmtegeneratie. In een turbulente stroming hebben we te maken met een forse scheiding tussen de lengteschalen die energie ontvangen en de lengteschalen die de energie dissiperen. Daar tussenin zit een gebied van allerlei, tamelijk kleine structuren die vooral als 'doorgeefluik' voor deze energie fungeren. Dit gebied staat bekend als het 'inertiële' gebied.

Het samenspel van convectieve en dissipatieve invloeden wordt wiskundig beschreven door de beroemde Navier-Stokes vergelijkingen. Dit model is al zo'n anderhalve eeuw beschikbaar en is op allerlei manieren aan de tand gevoeld en geanalyseerd door generaties van wetenschappers. Een maat voor de sterkte van de convectieve invloeden, ten opzichte van de dissipatieve effecten wordt weergegeven in het zogenaamde Reynolds getal. Een hoog Reynolds getal betekent dat de niet-lineaire convectieve effecten domineren en de stroming turbulent zal zijn. Bij een zeer laag Reynolds getal zijn dissipatieve effecten dominant en verloopt de stroming glad en geordend. Ze wordt dan laminair genoemd.

De complexiteit van een turbulente stroming kan ook in getallen worden gevangen. Het aantal rekenpunten dat noodzakelijk is om alle relevante details met voldoende precisie te kunnen bepalen is evenredig met het Reynolds getal in de macht $9/4$. Dat betekent bijvoorbeeld dat een toename van het Reynolds getal met een factor 10 een toename in het geheugengebruik van een computer met een factor van ongeveer 200 vraagt. Belangrijker is echter de hoeveelheid rekenwerk die een simulatie van de Navier-Stokes vergelijkingen vereist. Als we bedenken dat de kleinste structuren ook het snelst in de tijd variëren dan kan men laten zien dat dit rekenwerk groeit met de derde macht van het Reynolds getal. Een factor 10 stijging in het Reynolds getal kost dan zelfs 1000 keer meer rekenwerk.

De computer die daarvoor nodig is neemt al snel een astronomische omvang aan. Hoewel computers de afgelopen decennia gemiddeld elke 5 jaar een factor 10 sneller zijn geworden illustreert deze schalingswet een groot probleem voor de simulatie van praktisch relevante situaties. Zelfs een factor 1000 tot 10000 toename in verwerkingssnelheid levert niet veel meer op dan

ongeveer een factor 10 toename in Reynolds getal bij gelijkblijvende rekentijd. Op zo'n factor 1000 à 10000 versnelling moeten we, optimistisch gezien, echter wel 15 à 20 jaar wachten. En dat terwijl het gat tussen 'haalbaar Reynolds getal' en 'gewenst Reynolds getal' vaak vele malen groter is dan deze factor 10. Voor diverse praktijkproblemen zouden we al gauw een eeuw moeten wachten voordat computers groot genoeg zouden zijn om simulaties in alle detail aan te kunnen. Het zal duidelijk zijn dat dit geen optie is. In plaats daarvan lijkt het reduceren van de turbulente complexiteit in onze computer-modellen het enige alternatief op de kortere termijn. Dit maakt het probleem numeriek een stuk eenvoudiger en tegelijkertijd veel rijker geschakeerd en uitdagend omdat deze gewenste vereenvoudiging alleen mogelijk is door een



(a)



(b)

Figuur 6: Illustratie van het effect van ruimtelijke filtering. In (a) zijn sedimentwolken in een deel van de Kaspische zee ongefilterd weergegeven en in (b) is de gefilterde representatie te zien (visibleearth.nasa.gov). Het wegnemen van de kleinere details is niet sterk ten koste gegaan van de grotere structuren.

passende wiskundige modellering. Het is niet mogelijk om een 'botte bijl' methode te volgen - we zullen listiger moeten zijn.

Het alternatief van een minder gedetailleerde weergave van een turbulente stroming staat al sinds de jaren 80 flink in de belangstelling. Hiervoor zijn diverse 'gemiddelde' beschrijvingen ontwikkeld. Ik wil mij hier richten op zogenaamde large-eddy simulaties die gebaseerd zijn op een ruimtelijk gefilterde stroming. Zo'n filter is niets anders dan een gewogen gemiddelde van de stroming in een relatief klein volume. Signalen die weinig variëren in dit kleine volume worden nauwelijks door het filter gewijzigd terwijl structuren die veel variëren binnen dit volume na toepassing van het filter vrijwel geheel zijn verdwenen. De toepassing van zo'n ruimtelijk filter is geïllustreerd in figuur 6. We zien duidelijk een afname van het belang van de kleinere structuren na toepassing van het filter, terwijl de grotere contouren nog prima te herkennen zijn.

Een gefilterde oplossing kan met minder rekeninspanning worden bepaald. Filteren van de Navier-Stokes vergelijkingen introduceert echter een nieuwe complicatie. Wanneer de niet-lineaire convectieve termen worden gefilterd ontstaat een zogenaamd 'sluitingsprobleem'. We moeten eigenlijk iets uitrekenen wat we nou net hebben weggefilterd. Daar zullen we iets aan moeten doen omdat de óngesloten vergelijkingen niet kunnen worden gebruikt voor numerieke simulaties. Ze zijn eenvoudigweg incompleet.

Het sluitingsprobleem brengt tot uitdrukking dat de grotere structuren een effect voelen van alle kleinere structuren. Klein is daarbij gerelateerd aan de breedte van het filter. Voor deze effecten zal een model moeten worden geïntroduceerd. Maar hoe kan men zo'n model motiveren? Het is immers gebaseerd op de onbekende kleinere structuren in een turbulente oplossing die we nou juist willen bepalen. Deze ingewikkelde situatie staat model voor sluitingsproblemen in allerlei andere onderzoeksgebieden, zoals in de vastestof-fysica, in de polymeerfysica of in de fysische biologie. Uiteindelijk kan men niet zomaar een model 'verzinnen' maar zal de gefilterde beschrijving 'zoveel mogelijk' moeten blijven voldoen aan basisprincipes van de ongefilterde beschrijving. Welke basisprincipes en of 'zoveel mogelijk' ook echt genoeg is, is op voorhand niet aan te geven. Dat is onderwerp van een levendige discussie in de literatuur en maakt een enigszins experimenterende aanpak noodzakelijk.

Het bepalen of een sluiting ook echt geschikt is vereist een multidisciplinaire blik waar een toegepast wiskundige een centrale bijdrage aan kan leveren.

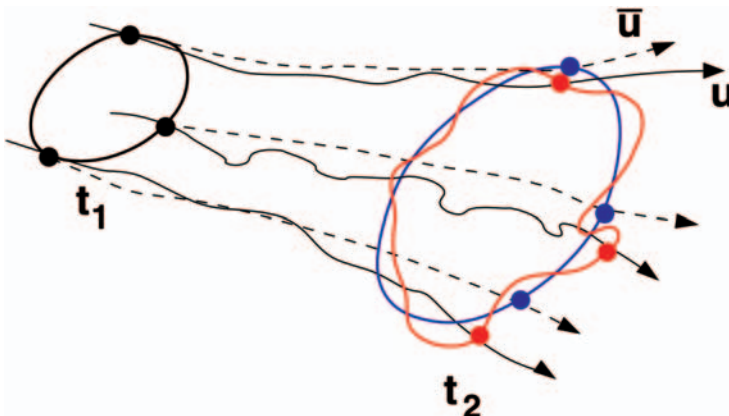
Het ontbreken van een compleet inzicht in de dynamica van kleinschalige turbulentie is aanleiding geweest voor een ruime collectie aan turbulentiemodellen waarmee de large-eddy vergelijkingen worden gesloten. Dit worden ook wel 'subgrid' modellen genoemd. Om wat structuur aan te kunnen brengen in deze modelleerwoede is een 'wiskundige stap terug' vereist waarmee men probeert om de essentie boven tafel te krijgen. Van dit werk wil ik één recent voorbeeld geven. Het bouwt voort op mijn vroegere samenwerking met Hans Kuerten en Bert Vreman in de groep van Pieter Zandbergen, waar ik met plezier aan terugdenk.

Een populaire fysische redenatie die tot een subgrid model leidt verloopt als volgt. Een sterke lokale dissipatie zal de intensiteit van de turbulentie reduceren. De mate van dissipatie wordt deels bepaald door de zogenaamde 'viscositeit'. Een hoge 'viscositeit', of in alledaags Nederlands, een hoge mate van 'stroperigheid', leidt dus tot een minder fijnschalige stroming. Een model dat een verhoogde viscositeit afgeeft daar waar kleine schalen de kop op willen steken, zal in ieder geval een gladder stromingsbeeld laten zien. Van dit type modellen zijn diverse voorbeelden geformuleerd. Deze aanpak levert gegarandeerd gladdere oplossingen, echter met wisselend succes wat de nauwkeurigheid betreft. De echte vraag is dan ook niet hoe een oplossing glad gemaakt kan worden, maar hoe de echte effecten van de kleinere schalen correct kunnen worden weergegeven. Gelukkig biedt de wiskunde een mooi alternatief. In plaats van het 'repareren' van de gefilterde vergelijkingen met een pragmatisch model, biedt het vasthouden aan wiskundige eigenschappen van de gefilterde vergelijkingen een belangrijke leidraad voor succesvolle modellen.

Dit motief is goed te herkennen in zogenaamde regularisatiemodellen. Daarin worden de convectieve termen direct veranderd, in plaats van het poneren van een subgrid model achteraf. Voor deze regularisatiemodellen is een elegante variationele formulering mogelijk die een precieze interpretatie en een systematische uitbreiding naar complexe situaties mogelijk maakt.

Ter illustratie wil ik kort stilstaan bij Leray regularisatie en NS- α modellering. In het geval van Leray regularisatie onderscheidt men twee verschillende vloeistofsnelheden. Ten eerste is er het snelheidsveld dat door de vergelijkingen wordt voorspeld. Ten tweede is er het snelheidsveld waarmee de oplos-

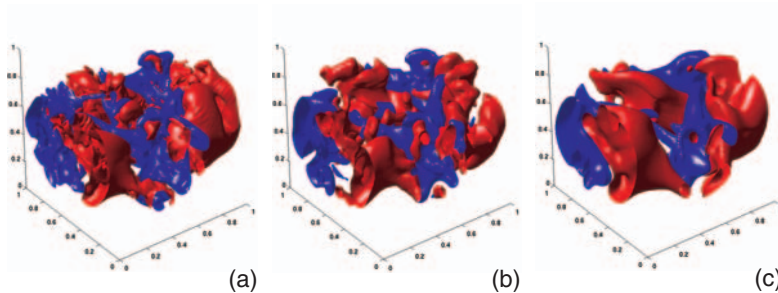
sing wordt getransporteerd. In geval van de Navier-Stokes vergelijkingen zijn deze beide snelheden identiek. Bij Leray regularisatie kiest men er echter voor om de 'transportsnelheid' gelijk te nemen aan de gefilterde snelheid. Hierdoor kan men de niet-lineariteit naar believen 'temmen'. De gebruiker van dit model heeft dus zelf controle over de gladheid van de oplossing, precies wat men zou willen.



Figuur 7: *NS- α modellering is gebaseerd op een gefilterde Kelvin circulatie. In plaats van een kringintegraal rond de rode contour, die met de ongefilterde turbulente snelheid u in de stroming beweegt, wordt de circulatie bepaald op basis van de blauwe contour die met een gladder, gefilterd snelheidsveld voortbeweegt. Dit principe maakt een systematische afleiding mogelijk van een sub-filter model voor de dynamica van de kleine schalen.*

Bij het NS- α model grijpt de 'turbulentie-modelleur' in op het niveau van het variatieprincipe dat aan de Navier-Stokes vergelijkingen ten grondslag ligt. Dit model is inzichtelijk gemaakt in figuur 7. Een beroemde stelling van Kelvin zegt dat de kringintegraal van de snelheid rond een gesloten, met de stroming meebewegende contour behouden is voor een niet-viskeuze vloeistof. Dit principe kan worden gebruikt om de convectieve termen in de Navier-Stokes vergelijkingen af te leiden. Analoog aan het Leray-principe, wordt in de NS- α modellering gekeken naar een kringintegraal rond een met de gefilterde snelheid bewegende contour. Deze gefilterde Kelvin stelling is equivalent aan

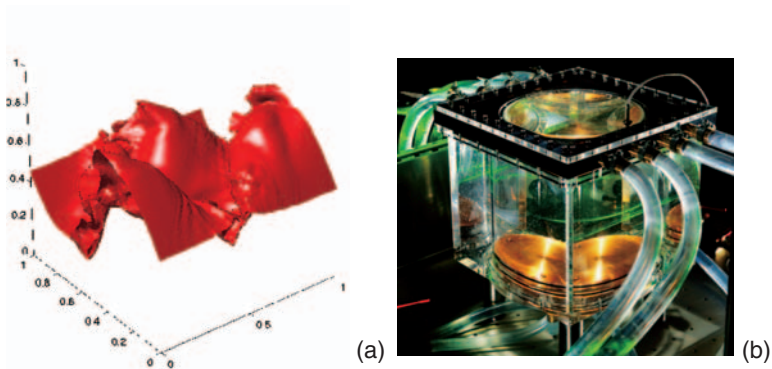
de zogenaamde Euler-Poincaré vergelijkingen. Met wat moeite kan men hier weer de large-eddy vergelijkingen in herkennen en het geïmpliceerde model 'aflezen'.



Figuur 8: Turbulente menging zoals wordt verkregen met directe numerieke simulatie (a) of met large-eddy simulatie gebaseerd op het NS- α (b) of het Leray (c) model.

Ook wiskundig elegante modellen ontkomen niet aan een confrontatie met de volledige oplossing van de Navier-Stokes vergelijkingen. In figuur 8 wordt de ongefilterde oplossing vergeleken met de Leray en NS- α voorspellingen. De globale overeenstemming tussen gefilterde oplossing en large-eddy voorspellingen is direct te zien. Deze overeenstemming is ook gevonden voor allerlei afgeleide stromingsaspecten. Het zou echter te ver voeren om hier al te veel meer over te zeggen.

Regularisatiemodellering is ook uitgewerkt voor een aantal situaties waarin turbulentie modulatie van belang is. In die gevallen stellen we een turbulente stroming bloot aan één of meer externe mechanismen. Dit geeft zowel inzicht in turbulentie als in de large-eddy modellering ervan. Een mooi voorbeeld is turbulente verbranding, zoals te zien is in figuur 9a. Het turbulente mengproces van brandstof en zuurstof wordt danig belemmerd door de warmte die bij de verbranding vrijkomt. Dit fenomeen wordt correct weergegeven met regularisatiemodellen, zonder dat daarvoor allerlei modelparameters moeten worden geïntroduceerd.



Figuur 9: Een onderdeel van een vlamoppervlak zoals door regularisatie-modellering wordt voorspeld (a) en een experimentele opstelling waarmee roterende Rayleigh-Bénard convectie wordt onderzocht (b).

Een goede voorspelling is ook gevonden voor turbulente stroming waarin rotatie en zwaartekracht een rol spelen. Dit treedt bijvoorbeeld op in roterende Rayleigh-Bénard convectie. In figuur 9b is een experimentele opstelling te zien behorende bij het promotiewerk van Rudie Kunnen in Eindhoven. Water wordt van onderaf opgewarmd, vergelijkbaar met alledaagse kookpraktijken. Door dichtheidsverschillen zullen er wervelingen in het water optreden. Het warmtetransport tussen bodem en deksel zal hiermee samenhangen. Dit staat bekend als Rayleigh-Bénard convectie. Wanneer we deze hele stelling op een grote draaiende tafel zetten kunnen we de effecten van rotatie op dit turbulente warmtetransport onderzoeken. Dat is natuurlijk niet meer iets wat u in uw keuken zou doen. Het levert een modelsituatie op waarmee warmtetransport in sommige geofysische problemen kan worden nagebootst. Op zijn beurt is dit weer relevant voor het begrijpen van bijvoorbeeld oceaancirculatie, voor uitwisselingsprocessen tussen oceanen en atmosfeer en daarmee ook voor het begrijpen van scenario's voor klimaatveranderingen. Ik vind dit een mooie illustratie van hoe men in een paar stappen van een onderzoek gericht op turbulent transport kan komen tot connecties met een belangwekkend maatschappelijk probleem.

De regularisatiemodellering laat zich ook naar tal van andere situaties uitbreiden. Interessante toepassingen ontstaan wanneer bijvoorbeeld elektromagnetische velden de stroming aandrijven, of bij stroming in de buurt van complexe randen zoals ik samen met Arek Kuczaj heb kunnen onderzoeken, of in het geval van dispersie van grote aantallen deeltjes. In het laatste geval kunt u bijvoorbeeld denken aan kleine luchtbellens in water of katalyse deeltjes in een chemische reactor zoals in de groepen van Detlef Lohse en Hans Kuipers worden bestudeerd. In al die gevallen zijn de voorspellingen op basis van regularisatiemodellen minstens zo nauwkeurig gebleken als voorspellingen die zijn verkregen met één van de meer pragmatische modellen. Dat is bemoedigend maar laat ook een wat ontevreden gevoel over. Waar een mooie wiskundige stelling met een sluitend bewijs voor eens en altijd kan worden afgedekt, is het eigen aan deze turbulente modellering dat men een meer experimenteel element moet accepteren en de 'kwaliteit' van een voorspelling van geval tot geval aan geschikte tests moet onderwerpen.

Wiskunde en het leefmilieu

20

Wiskunde in het groot en in het klein

Traditioneel is veel onderzoek naar turbulente stromingen gericht op problemen uit de techniek. Voorbeelden te over, zoals verbranding, aerodynamica, akoestiek, interactie tussen stroming en constructies, turbomachines, etc. etc.. Een mooie nieuwe kans voor moderne toegepaste stromingsleer ligt in het bewaken en voorspellen van het Nederlandse leefmilieu. De menselijke invloed is in drukbevolkte rijke landen als Nederland zo ver toegenomen dat een actief managen van onze leefomgeving noodzakelijk wordt. Ook hier kan een toegepast wiskundige aanpak een centrale rol vervullen.

Met de aanleg van een overdekkend netwerk van sensoren kan informatie omtrent temperatuur en luchtdruk, maar ook concentraties van allerlei stoffen altijd en overal in Nederland beschikbaar komen. Door gebruik te maken van miniaturisatie kan een dicht weefsel van informatie worden gecreëerd. De integratie van zo'n datastroom met een nauwkeurige modellering van de belangrijkste fysische en chemische processen zal een prachtige omgeving vormen waarmee gedetailleerde voorspellingen kunnen worden gedaan. Dit kan bijvoorbeeld worden ingezet voor het beheersen van extreme korte termijn wateroverlast, of helpen bij rampen zoals branden of industriële ongelukken. Maar ook belangen op de langere termijn kunnen worden gediend. Te denken is daarbij aan de fijn stof problematiek en andere aspecten van

luchtkwaliteit, of het simuleren van milieueffecten van grote ingrepen zoals een luchthaven of een windmolenpark in de Noordzee, of de consequenties van een verregaande klimaatverandering voor Nederland.

Een dergelijk wiskundig model van Nederland zou als een soort super 'Google Earth' de mogelijkheid moeten hebben om dynamisch te kunnen inzoomen. Daarbij zou niet alleen een mooi plaatje van het landschap moeten worden getoond, maar zou vooral belangrijke informatie over de korte- en langetermijnontwikkeling van tal van eigenschappen gelijktijdig moeten worden gesimuleerd. Om te kunnen slagen dienen natuurkundige, chemische en biologische principes zo compleet mogelijk en zo vroeg mogelijk in de ontwikkeling te worden opgenomen. Dit is een schoolvoorbeeld van een multiscale probleem.

Voorspellingen dienen te worden gedaan op nationale, regionale maar ook op veel kleinere schalen, zelfs tot op het niveau van individuele wijken en straten. De systematische modellering, het integreren van natuurkunde, scheikunde en biologie, de numerieke multiresolutie en nesting van modellen, het modelleren van stromingen over landschappen zijn allemaal aspecten waar toegepaste wiskunde een centrumrol kan vervullen. Een voorbeeld van een waarnemingssysteem is het NEON project dat recent in Amerika van start is gegaan. Hierin wordt een nationaal ecologisch observatienetwerk opgebouwd. Echter, om zo'n observatienetwerk echt van waarde te laten zijn voor de samenleving is de integratie met een wiskundige computermodellering vereist. Zonder wiskunde geen betrouwbare voorspellingen, niet voor de lokale kortetermijn- en ook niet voor langetermijntrends.

Wiskunde en complexe vloeistoffen

Na deze beschrijving van mijn interesses in macroscopische stromingen vol met turbulente wervelingen, wil ik nu overschakelen naar een geheel ander gebied van de stromingsleer. Ik wil kijken naar de wereld van het extreem kleine en het zeer langzame. Onder deze omstandigheden wordt het gedrag van eenvoudige vloeistoffen zoals water bepaald door zogenaamde 'viskeuze' effecten. Het corresponderende Reynolds getal is zeer klein. Dergelijke stromingen staan bekend als Stokes stromingen. Ongeveer een eeuw geleden zijn Stokes stromingen door één van Nederlands' grootste wetenschappers, Hendrik Antoon Lorentz, voor het eerst opgelost. In de jaren zestig van de vorige eeuw is dit probleem netjes wiskundig onderbouwd, met name door de Russische wiskundige Ladyzhenskaya.

Bij de beschrijving van turbulentie heb ik aangegeven dat 'spannende' stromingen ontstaan ten gevolge van de convectieve niet-lineariteit en dat viskeuze effecten vooral deze levendigheid 'dempen'. Je zou dus verwachten dat een stroming die door viskeuze effecten wordt gedomineerd niet al te veel interessants zal hebben. Het probleem is analytisch opgelost - klaar. Waarom wil ik dan toch nog naar dit regime kijken? De reden is dat er een tweetal belangrijke uitbreidingen mogelijk zijn die van dit stromingsregime meteen weer een interessant werkterrein maken, met prachtige nieuwe toepassingen. De uitbreidingen waar ik aan denk ontstaan aan de ene kant door het gebruik van complexe vloeistoffen die een stuk exotischer gedrag laten zien dan bijvoorbeeld water, en aan de andere kant door toepassing van voornamelijk waterige vloeistoffen, maar met een complexe inwendige structuur vol met beweeglijke randen. Daar wil ik nu nader op ingaan.

Tot nog toe heb ik gekeken naar eenvoudige stoffen als water en lucht. Dit zijn voorbeelden van zogenaamde Newtonse stoffen en hun gedrag wordt prima beschreven met de Navier-Stokes vergelijkingen. Kenmerkend is dat de viscositeit een materiaaleigenschap is. Het maakt niet uit wat de stromingscondities zijn, de viscositeit is altijd gelijk. Er zijn echter ook tal van vloeistoffen waarin de viscositeit geheel of gedeeltelijk wordt bepaald door de stromingscondities. Dit worden niet-Newtonse vloeistoffen genoemd. Deze materialen kunnen zeer uiteenlopend gedrag laten zien. Als voorbeeld, een oplossing van maizena in water zal steviger aanvoelen naarmate men dit mengsel krachtiger roert. Dit wordt shear thickening genoemd. Bij voldoende hoge concentraties en snelle bewegingen kan dit materiaal voldoende weerstand bieden

om zelfs over te kunnen lopen. Het omgekeerde bestaat ook. Een materiaal als verf wordt 'vloeibaarder' naarmate men het krachtiger roert - dit staat bekend als shear thinning.

De relatie tussen materiaaleigenschappen en stromingscondities wordt voor niet-Newtonse stoffen uitgedrukt in een zogenaamde constitutieve relatie. De macroscopische consequenties van de bijzondere microscopische structuur van het materiaal komen hierin tot uitdrukking. U kunt bijvoorbeeld denken aan een materiaal dat bestaat uit lange moleculen die in een beweeglijke kluwen elkaar in de weg zitten. Bij hoge concentraties zullen deze moleculen vooral langs hun eigen contour kunnen glijden en nauwelijks nog in de dwarsrichting.

Elk afzonderlijk molecuul is als een sliert spaghetti opgesloten door de andere slierten. Waarschijnlijk dacht de Franse wetenschapper de Gennes eerder aan een kuil met slangen toen hij als één van de eersten aan dit probleem werkte - dit fenomeen staat dan ook bekend als 'reptatie'. Wanneer men in dit materiaal zou roeren dan zal men shear-thinning te zien krijgen - harder roeren gaat relatief makkelijker. Op microscopische schaal zal men zien dat de spaghetti-slierten dan gemiddeld minder verweven zijn en meer gelijkgericht.

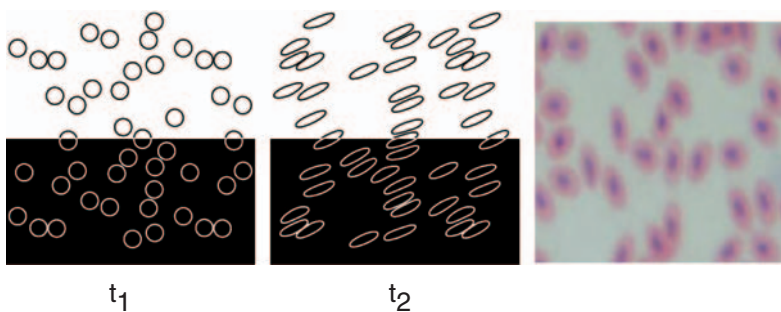
Het leggen van relaties tussen de microwereld en materiaaleigenschappen in de macrowereld is het terrein van de reologie. Ik leerde reologie voor het eerst kennen tijdens mijn promotie onder begeleiding van Frits Wiegels en wijlen Piet van der Wallen-Mijnlieff. Zij waren inspirerende voorbeelden die mij het belang van 'mooie theorie' hebben laten zien, met respect voor wiskundige elegantie en structuur, en beperking tot de essentie, wars van allerlei franje.

Op basis van constitutieve relaties kunnen uitbreidingen van de Navier-Stokes vergelijkingen worden afgeleid en kan men zich opnieuw gaan afvragen hoe deze materialen zich gedragen in een scala van stromingen. De basisvergelijkingen kunnen nu essentieel ander gedrag vertonen in diverse gebieden van een stroming. Dit vormt een belangrijke uitdaging voor de ontwikkeling van numerieke methodes voor de simulatie van deze materialen. Toepassingen zijn er te over in de chemische industrie, in de verwerking van voedsel en in de farmaceutische industrie.

In deze voorbeelden is het materiaal complexer gemaakt en daaraan kan complexer gedrag worden ontleend. Intrigerender is het wanneer men complex

gedrag kan waarnemen op basis van eenvoudige uitgangspunten. Dat kan bijvoorbeeld ontstaan wanneer men in een waterige vloeistof inwendige randen met hun eigen fysische wetten aanbrengt. Een mooi voorbeeld zijn zogenaamde vesicles – kleine druppels in water. Wanneer men zo'n druppel met rust laat dan zal hij een bolvorm aannemen. Dit is het resultaat van de oppervlaktespanning die aan de rand van de druppel heerst. Anders gezegd, de oppervlaktespanning zorgt ervoor dat individuele vesicles zich wat verzetten tegen vervorming. Bovendien zal bij hoge vesicleconcentratie de omstroming van het ene vesicle een invloed hebben op de omstroming van het andere vesicle. Dit staat bekend als hydrodynamische interactie die ook nog op vrij grote afstanden werkzaam is.

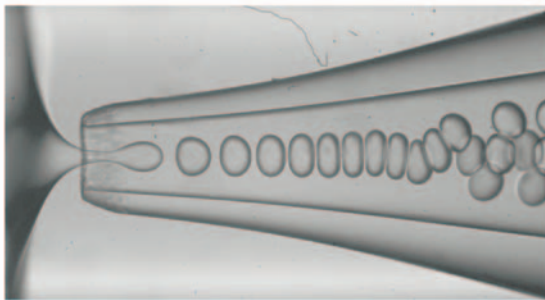
Het toevoegen van druppels, dus van inwendige randen of 'interfaces' kan aanleiding zijn voor interne ordening en collectief gedrag in reactie op een externe stroming. Deze zelforganiserende microstructuur is mooi waar te nemen in figuur 10, dat voortbouwt op werk dat ik met Matthijs Toose heb



Figuur 10: Zelforganiserende microstructuur in complexe vloeistoffen.

Deze structurering heeft een directe invloed op de macroscopische eigenschappen van de vloeistof onder allerlei stromingscondities. De aanvankelijk bolvormige druppels (tijdstip t_1) worden aan een afschuifstroming onderworpen waarbij de stroming in het onderste (zwarte) deel naar links is en in het bovenste deel naar rechts. Na korte tijd zijn druppeldefomatie en ordening over wat langere afstanden goed te zien in de opname op tijdstip t_2 . Deze ordening vertoont enige gelijkenis met structurering in bloed zoals te zien is in het meest rechtse figuur.

kunnen doen. De diverse vesicles zijn vervormd en niet langer bolletjes. Bovendien vindt er een dynamische groepering plaats waarin vesicles een rijtje vormen en zo in elkaars zog wat kunnen ‘schuilen’ tegen de krachten ten gevolge van de stroming. In totaal vertoont dit systeem shear-thinning gedrag. Dit is een mooi voorbeeld van een systeem waarvan de modellering Newtons begint en het gedrag niet-Newton's eindigt enkel door de toevoeging van oppervlaktespanning en de optredende dynamische zelforganisatie.



Figuur 11: Manipulatie van kleine druppels: opbreken, transport, vervorming en samenvloeien zijn centrale stappen om tot geschikte lab-on-a-chip toepassingen te komen (deas.harvard.edu).

We kunnen het systeem verder verkleinen en niet meer kijken naar de interactie tussen een aantal druppels in water, maar naar de stroming in de druppels zelf. Bij het manipuleren van kleine druppels speelt het vormen en vervormen, het transporteren ervan en het laten samenvloeien of opbreken een centrale rol. In figuur 11 is een voorbeeld van het opbreken in kleinere druppels en de daaropvolgende vervorming te zien. Dergelijke druppels kunnen worden gebruikt om biologische cellen in te kapselen en vervolgens hun reactie op mechanische belasting te onderzoeken. Het is ook mogelijk om druppels met een complexe inwendige structuur te maken, bijvoorbeeld door een gelaagde ‘schil’ aan te brengen. Dit type druppels zou in de toekomst kunnen worden ingezet om op een gecontroleerde manier en zeer lokaal medicijnen toe te dienen. Het is dan des te meer van belang om een goed inzicht te hebben in de mechanische eigenschappen van deze druppels. Hiervoor kunnen nauwkeurige computermodellen uitkomst bieden.

Het mengen van vloeistoffen in zeer kleine druppels staat sterk in de belangstelling vanwege zogenaamde lab-on-a-chip toepassingen. Hierbij worden diverse chemische processtappen op een chip van slechts enkele millimeters geconcentreerd. Dit heeft allerlei biomedische toepassingen waarbij men uiterst kleine hoeveelheden complexe vloeistof wil analyseren of synthetiseren. Daarbij zijn diverse processtappen noodzakelijk die op microscopische schaal plaatsvinden. Menging is één van die processtappen. Zonder ingrijpen zou deze menging alleen via diffusie kunnen verlopen en erg langzaam zijn. Op deze kleine schalen kan men echter een druppel tot op zekere hoogte 'kneeden' en daarmee het mengproces aanzienlijk bespoedigen. Elegante experimenten waarbij het electrowetting mechanisme wordt gebruikt voor dit 'kneedproces' worden hier in Twente uitgevoerd in de groep van Frieder Mugele. Dit biedt unieke mogelijkheden voor een nauwkeurige validatie van een numerieke simulatiemethodiek gebaseerd op Stokes stroming. Omgekeerd kan numerieke simulatie een essentiële bijdrage leveren aan het begrijpen en optimaliseren van diverse processtappen in dit type microfluidicsproblemen.

Wat zouden we tegen kunnen komen als we nog verder zouden afdalen in lengteschaal en ons systeem serieus veel kleiner zouden maken? Daarmee verlaten we het terrein van de microfluidics en komen in het gebied van de nanofluidics. Bijna geen vloeistof zal dan bijna niet stromen. Is daar nog wat te beleven voor een toegepast wiskundige? Mijn persoonlijke antwoord is 'ja', de uitdagingen waar men dan voor gesteld staat hangen samen met de grenzen aan continuüm modellen. Bij het verder en verder verkleinen van de systemen zal men eerst merken dat de Navier-Stokes vergelijkingen geen goede beschrijving meer geven, vervolgens zal men tegen de grenzen van de statistische beschrijving aanlopen die gebaseerd is op de Boltzmann vergelijking en tenslotte zal men geconfronteerd worden met het deeltjeskarakter van de vloeistof waarvoor moleculaire dynamica kan worden ingezet. Op de kleinste schalen zal men mogelijk moeten uitwijken naar quantum-fluid-dynamics. Dit is een voorbeeld van een multiscale aanpak voor minuscule systemen waar een toegepast wiskundige veel plezier aan kan beleven, maar die ook nauw aansluit bij moderne natuurkunde en scheikunde. De grenzen tussen deze disciplines vervagen dan en wat overblijft is een mooi onderwerp voor wetenschappelijk onderzoek, zonder het keurslijf van een disciplinelabel.

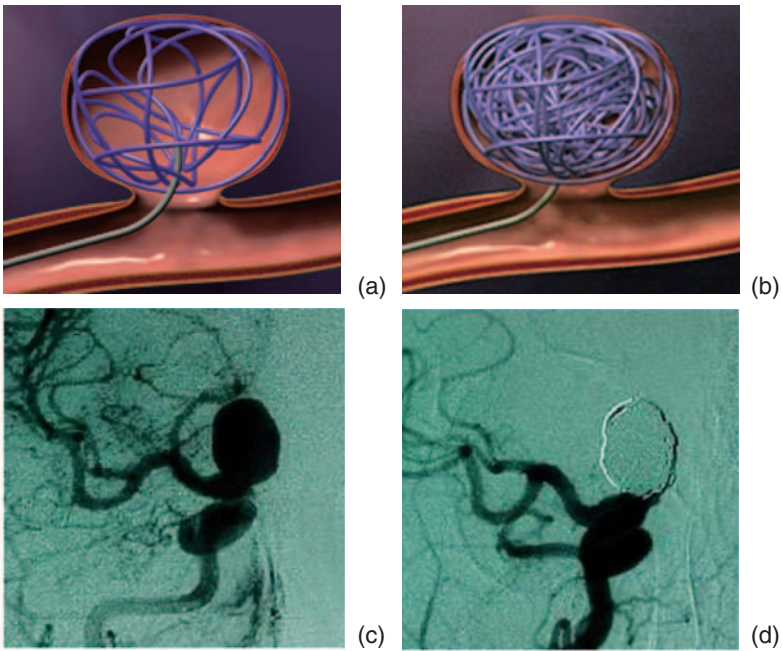
Wiskunde, biologie en geneeskunde

Voor mij ligt de ultieme toepassing van stromingsmechanica van kleine systemen in de biologie en de geneeskunde. Veel levensprocessen vinden plaats bij laag Reynolds getal, in situaties met een uitgesproken inwendige structurering. Het begrijpen waarom nou net die éne structuur zich vormt en hoe die reageert op veranderende omstandigheden en prikkels is een boeiend terrein. Ook hier kan een wiskundige grondslag, bijvoorbeeld in de vorm van modellering die uitgaat van een geschikt variatieprincipe, vruchtbaar zijn. Zo'n aanpak kan orde scheppen in deze zeer complexe materie en ondersteuning bieden bij de interpretatie van waargenomen gedrag.

Ik verwacht dat deze studie ook van waarde zal zijn om problemen met self-assembly in nanotechnologie beter te begrijpen. De befaamde 'nanorobots' die sommigen al hebben voorspeld en fantastische eigenschappen hebben toegevoegd kun je namelijk niet met schroevendraaier en tang in elkaar zetten. Ze dienen zichzelf te bouwen, in zekere zin 'spontaan' te ontstaan, mits wij maar de correcte omstandigheden creëren. Een prachtig voorbeeld van een zichzelf samenstellend systeem is zeer dichtbij – we zijn het zelf. We kunnen 'spieken bij de natuur' om slimme technologische miniaturisaties te ontwikkelen.

Veel toepassingen van stromingsleer richten zich op de stroming van bloed, met name in het hart en de grotere lichaamsslagaderen, zoals de aorta. Ingewikkelde rekenmodellen zijn gemaakt om de stroming door gezonde maar ook door zieke aderen te begrijpen. Dit heeft sterk bijgedragen aan de ontwikkeling van kunstmatige hartkleppen en aortakleppen. Langzamerhand worden numerieke simulaties ook gebruikt om het gevaar van scheuren van de aortawand te voorspellen en misschien in de toekomst patiëntspecifieke ondersteuning van chirurgische ingrepen mogelijk te maken.

Ik wil me vooral richten op zogenaamde aneurysmes die zich in de hersenen kunnen vormen. Door een zwakke plek in een aderwand kan de wand zich uitstulpen en een slecht doorbloede holte vormen. Deze zijn vaak niet veel groter dan enkele millimeters. Zo'n aneurysme is in figuur 12 weergegeven. De ader kan kapot gaan op deze plekken wat de patiënt serieus kan beschadigen en tot levensbedreigende situaties kan leiden. Operatieve ingrepen zijn mogelijk maar risicovol. Eén van de oplossingen bestaat er uit dat een chirurg een flexibele draad in het aneurysme weet te manoeuvreren. Daartoe dient een



Figuur 12: Aneurysme in een bloedvat in de hersenen voor (a) en na (b) behandeling via inbrengen van een flexibele platina draad. Angiogrammen voor (c) en na (d) behandeling illustreren dit principe in een praktijksituatie. Het aneurysme is de donkere 'blob' op het beeld - nadat het aneurysme gevuld is met de draad kan bloed er niet meer instromen (<http://www.brainaneurysm.com/>).

lange draad via een ader naar de gewenste plek in de hersenen te worden gebracht en vervolgens een flexibel deel van deze draad als 'opvulling' in het aneurysme te worden 'opgevouwen'. Na het inbrengen van zo'n 'coil' wordt de stroom van bloed door het aneurysme onmogelijk. Op termijn kan het lichaam zichzelf verder repareren waarmee het gevaar weg is.

Dit is de mooie variant van het verhaal. Echter, het inbrengen van zo'n draad op een toch al zwakke plek kan er toe leiden dat juist dán de ader scheurt en er een bloeding optreedt. Bovendien kunnen mensen jarenlang zonder problemen met meerdere zwakke plekken in hun bloedvatstelsel leven. De kunst is om te weten wanneer in te grijpen en hoe dat dan te doen. Dit is een complex terrein waar de inzet van simulatiemethodieken heel vruchtbaar kan zijn. In combinatie met moderne visualisatietechnieken kunnen daarmee de gewenste patiëntspecifieke voorspellingen mogelijk worden. In Twente wordt hier in de groep van Kees Slump aan gewerkt. Voor iemand als ik die alleen met de modellering bezig is geeft dit unieke kansen op een grondige validatie van de rekenmodellen.

Diverse stappen in het operatieve proces kunnen nader in kaart worden gebracht. Een voorbeeld is de modellering van het inbrengen van de flexibele draad. Dit is een 'oefening' in Stokes stroming én in het modelleren van de interactie tussen de stroming en de beweeglijke draad. Behalve voor de optimalisatie van procedures en materialen kan dit op termijn dienen als een soort 'flight simulator' voor een chirurg en behulpzaam zijn bij de opleiding en training. Goede mogelijkheden zijn er ook om het 'zelfreparerende' proces na inbrengen van een 'coil' te modelleren en zo te kunnen bepalen hoeveel van die risicovolle operatiestappen minimaal nodig zijn om goede langetermijn prognoses te kunnen realiseren.

Als we ook hier weer afdalen in lengteschalen dan komen we al snel tot een natuurlijke bouwsteen in de vorm van een enkele biologische cel. De numerieke modellering van de basisprocessen die centraal staan bij het functioneren van deze bouwsteen, en hun onderlinge beïnvloedingen is een uitdaging die minstens zo groot is als het in kaart brengen van het menselijk genoom enkele jaren geleden was. Dit is een onderdeel van Computational Life Sciences. Ik zou me willen richten op het effect van mechanische en chemische belasting van individuele cellen of van tissue fragmenten. Hiermee zou een beter inzicht kunnen worden bereikt in tissue engineering en in cellulaire interacties en signalering. Op basis van computermodellen zou men een virtuele cel kunnen bouwen en de effecten van bepaalde medicijnen kunnen nabootsen. Dit is voor een deel toekomstmuziek, maar wel van een soort dat tamelijk precies in het verlengde ligt van mijn eerdere onderzoek. Mensen die mij al langer kennen weten dat daarmee op onverwachte manier en met een vertraging van zo'n 25 jaar een deel van mijn cirkel rond is.

Bouwen en doorgeven

Uit mijn verhaal tot nu toe zal het u duidelijk zijn geworden dat mijn eerste liefde bij wetenschappelijk onderzoek ligt. Echter, om boven het niveau van het zoveelste artikel, of de zoveelste voordracht uit te kunnen stijgen zijn andere dingen nodig. Het doorgeven van wetenschappelijke kennis en fascinatie voor onderzoek reken ik meer en meer tot mijn taak.

Ik heb het geluk gehad om al met veel promovendi en postdocs samen te hebben gewerkt. Dat is een prachtige mix van professionaliteit en persoonlijk contact waar ik veel energie in stop, maar ook veel energie van terugkrijg. Ieder van deze samenwerkingen heeft zijn eigen dynamiek, die van een relatie van 'leraar-leerling' evolueert tot één van samenwerkende collega's. Een volgende stap in dit spel is het bouwen van samenwerkingsverbanden. Dat is vaak een interessant en op zijn minst niet-lineair proces waar niet alles plezierig is maar wel leerzaam. Ik probeer mijn bijdrage te leveren door mee te helpen bij de organisatie van workshops en cursussen, of bij het opzetten van onderzoeksnetwerken binnen Nederland of in Europa. Voorbeelden waar ik bij betrokken ben zijn het platform voor geophysical en environmental fluid mechanics en de Europese COST Actie op het gebied van large-eddy simulatie. Dat worden hopelijk mooie katalysatoren voor succesvol wetenschappelijk onderzoek dat boven losse projecten uitstijgt. Alleen door voldoende omvang te krijgen kan dit soort onderzoek een echte invulling geven aan zijn maatschappelijke rol.

Een minstens zo mooie maar ook wat problematische manier om gevoel en liefde voor wetenschap over te brengen is via onderwijs. Inspireren van studenten zou mooi zijn. De praktijk is echter vaak anders in het wiskunde-onderwijs; veelal beperkt het zich tot het aanleren van een collectie vaardigheden. Die komen vaak pas tot leven in de juiste samenhang, maar dat aspect is moeilijk te realiseren in de vorm van service-onderwijs, meestal aan niet-wiskunde studenten. Het punt waarop liefde voor exacte vakken als wiskunde zou moeten worden aangewakkerd zou veel eerder moeten liggen - op de middelbare scholen en in het basisonderwijs. Daartoe moeten we wel eerst de leraren zelf meekrijgen. Omdat 'goed voorgaan goed doet volgen' zou ik willen pleiten voor innigere contacten tussen middelbare scholen en universiteiten. Ook richting basisonderwijs zijn er goede mogelijkheden, bijvoorbeeld in de vorm van speciale programma's voor talentvolle leerlingen.

Het problematische hangt voor een deel samen met het imago dat wiskunde en wiskundigen hebben in Nederland. Ik hoef daar niet veel van te zeggen - óf u bent het eens met de bewering dat wiskunde moeilijk, een beetje raar en eigenlijk niet zo heel belangrijk is, óf u bent een collega die weet dat toegepaste wiskunde een heel mooi en praktisch vak is, gericht op het vinden, beschrijven, bestuderen en benutten van 'de rode draad' in allerlei problemen. Dat problematische imago levert een landelijk beeld op van zeer geringe studentenaantallen en daarmee kwetsbare opleidingen. Er zijn echter genoeg manieren om toegepaste wiskunde te bedrijven door actieve verplechting met andere disciplines. Dat doet niets af aan het eigene van toegepaste wiskunde - het is alleen een andere werkwijze. Ik ben er van overtuigd dat wiskunde op deze manier uitgedragen zich moeiteloos staande kan houden, omdat de combinatie van wiskundige abstractie en wiskundige vingervlugheid onmisbaar is bij vrijwel elk facet van vrijwel elk wetenschappelijk onderzoek en vrijwel elke voortgezette opleiding.

Tenslotte, de Nederlandse politiek zou er goed aan doen om meer in te zetten op een continu lerende samenleving. In een land als Nederland zijn mensen het enige echte kapitaal. Die moeten zich in vrijheid kunnen ontwikkelen, waarbij iedereen gestimuleerd zou moeten worden om zijn of haar maximale bijdrage te leveren. Dat is woekeren met talenten - niet alleen een noodzaak maar ook socialer op langere termijn.

Dankwoord

Ik wil mijn oratie graag afsluiten door een aantal mensen en instellingen apart te noemen en te bedanken. Allereerst dank ik het College van Bestuur voor het in mij gestelde vertrouwen.

Geachte collega's van de Twentse instituten IMPACT en BMTI, en van de Universiteit Eindhoven;

Ik hoop onze samenwerkingen voort te zetten en nieuwe relaties op te bouwen. Ik zie onze gezamenlijke ontdekkingstochten met plezier tegemoet en hoop nog vaak de diverse grenzen tussen faculteiten, onderzoeksgebieden en instituten over te steken.

Beste wiskunde en natuurkunde collega's in Twente en Eindhoven,

Ik realiseer me dat mijn expliciete keuze om mijn werk te concentreren op het raakvlak van de Natuurkunde en de Toegepaste Wiskunde, mij wat 'verdacht' maakt vanuit beider perspectief. Ik beken echter wel degelijk kleur voor mooie wetenschap en samenwerking over deze disciplinegrenzen heen. Het exacte label dat mijn werk dan krijgt vind ik van ondergeschikt belang. Ik wil jullie allen bedanken voor de open samenwerkingen die zijn ontstaan en hoop die verder vorm te kunnen geven in onderzoek en onderwijs.

Zeergeleerde Streng, zeergeleerde Van Damme,

Beste Martin, beste Ruud, we zijn gedrieën aan een avontuur begonnen met Bubbling Minds om invulling te geven aan Applied Scientific Computing in zijn breedste zin. Vele aspecten van het interface tussen universiteiten en hightech industrie ben ik voor het eerst aan het ontdekken en ik wil deze spannende tocht graag met jullie verder ondernemen.

Hooggeleerde Van der Vegt,

Beste Jaap, ik wil je graag bedanken voor de ruimte die je me hebt gegeven om in Twente mijn werk verder te ontwikkelen. Ik hoop dat we nog regelmatig tot elkaars steun kunnen zijn. De rol van wiskunde en wiskundigen in Twente wordt op nieuwe wijzen uitgedaagd - graag probeer ik daar samen een professioneel antwoord op te geven.

Hooggeleerde Van Heijst, hooggeleerde Clercx, hooggeleerde Van de Water

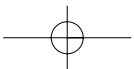
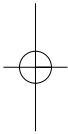
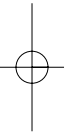
Beste GertJan, beste Herman, beste Willem, dank voor de collegiale manier waarop jullie mij in Eindhoven hebben opgenomen. Het geeft mij een unieke kans om invulling te geven aan mijn liefde voor mooie Natuurkunde en de versmelting van toegepaste Wiskunde daarmee. Ik hoop dat mijn verdere bijdrage aan het Laboratorium in Eindhoven stimulerend zal zijn in de komende jaren.

Vader en moeder,

Ik ben jullie heel veel dank verschuldigd voor mijn onbezorgde jeugd in Teeffelen en het grenzeloze vertrouwen dat jullie altijd in mij hadden. Jullie komen beiden uit grote Brabantse gezinnen en hebben niet eens de kans gehad om de lagere school af te maken. Maar jullie hebben mij de kans om te studeren wél gegeven. Hoe anders is het daardoor voor mij verlopen. Mijn studie opende een geheel andere wereld die ik alleen in kon gaan in de zekerheid dat ik altijd op jullie kon bouwen. Jullie interesse in mijn reilen en zeilen is tot de dag van vandaag een constante stimulans.

Tenslotte wil ik Barbara en mijn kinderen Michel en Nathalie bedanken. Mijn passie voor mijn werk heeft er vaak voor gezorgd dat ik niet thuis was voor jullie; ik was of op reis of anders wel in gedachten verzonken achter mijn laptop. Daardoor hebben jullie veel dingen al vroeg zelf moeten oppakken en heb ik jullie niet altijd kunnen steunen. De laatste tijd hebben we gelukkig ook de kans gehad om samen wat vaker op reis te gaan. We praten nog regelmatig, en met plezier over ons verblijf in London of in Brussel van de afgelopen jaren. Dat heeft niet alleen mijn wereld verbreed maar was ook een mooie kans om samen dingen te ondernemen. Michel en Nathalie, ik hoop dat de balans positief zal blijken en dat het zal helpen in jullie toekomstige keuzes. Barbara, ik hoop dat we nog vaak een reis delen zodat mijn wereld ook onze wereld kan blijven.

Hartelijk dank voor uw aandacht. Ik heb gezegd.





Universiteit Twente
de ondernemende universiteit