

K O N I N K L I J K E N E D E R L A N D S E
A K A D E M I E V A N W E T E N S C H A P P E N

Prof. dr. J.J. Engelen
Voorzitter Algemeen Bestuur NWO
Postbus 93138
2509 AC 'S-GRAVENHAGE

Amsterdam, 10 september 2009
Kenmerk TWINS/SH/4681

Betreft Instelling NCCS

Contactpersoon Shu-hui Tan
Doorkiesnummer 020 5510 830

Geachte heer Engelen,

Computational Science (CS) is een snel groeiend multi- en interdisciplinair onderzoeksgebied waarbij geavanceerde computationele modellen en data analyses worden aangewend om wetenschappelijke en maatschappelijke problemen op te lossen. Het succes van CS in het berekenbaar maken en simuleren van complexe processen heeft inmiddels een niveau bereikt waardoor CS terecht de traditionele pilaren van theorie en experimentatie complementeert.

Nederland heeft een sterke uitgangspositie om internationaal te excelleren op dit onderzoeksgebied. Door grote investeringen is de computer- en netwerkinfrastructuur goed ontwikkeld. Daarnaast is Nederland leidend in wetenschapsgebieden waar door gebruik van CS grote doorbraken zijn te verwachten. De huidige situatie lijkt echter meer ontstaan door een proactieve houding van verschillende partijen in het veld dan vanuit een overkoepelende strategische visie. Hierdoor zijn sterke kernen ontstaan, maar ontbreekt het aan synergie tussen de verschillende ontwikkelingen. Voor de Raad voor de Technische Wetenschappen, Wiskunde en Informatica, Natuur- en Sterrenkunde en Scheikunde (TWINS raad) van de KNAW is deze constatering aanleiding om een advies op te stellen.

Dit advies wordt momenteel uitgewerkt onder auspiciën van de TWINS Raad KNAW. Met dit advies wil de KNAW mede richting geven aan de verdere versterking van CS in Nederland.

De basis van dit advies is gelegd in januari 2009 tijdens een rondetafelbijeenkomst waaraan 18 deskundigen uit de verschillende gebieden hebben deelgenomen gevolgd door twee verbredende bijeenkomsten. Aan de eerste bijeenkomst namen 85 deskundigen deel verdeeld over de vakgebieden: wiskunde, informatica, astrofysica, fysica, chemie, biologie, geneeskunde, neurowetenschappen, technische wetenschappen en aard- en klimaat wetenschappen. 4 juni 2009 vond de bijeenkomst Computational Humanities plaats waaraan 50 deskundigen deelnamen.



Tijdens deze bijeenkomsten is uitgebreid gediscussieerd over de wetenschappelijke en maatschappelijke vragen waarbij CS een cruciale rol kan spelen en de knelpunten die gesignaleerd worden. De TWINS Raad KNAW heeft dan ook verheugd kennis genomen van een aantal reeds lopende CS gerelateerde initiatieven zoals de installatie van een Nederlandse node van het Centre Europeen de Calcul Atomique et Moleculaire (CECAM) bij het Lorentz Center (LC), in samenwerking met het Amsterdam Center for Multiscale Modeling (ACMM), onder de auspiciën van NWO.

De Raad is van mening dat dit het moment is om CS een extra impuls te geven nu, via deze node, de Nederlandse onderzoeksinspanningen op het gebied van CS direct in de internationale onderzoeksarena te integreren zijn en vice versa.

Wel pleit de KNAW voor het verbreden van de Nederlandse node naar alle disciplines. Mocht verbreding binnen het CECAM niet mogelijk zijn, dan moet gezocht worden naar andere wegen. CS is bij uitstek een multidisciplinair vakgebied waar onderzoek op de grensgebieden tot grote doorbraken kan leiden. Integratie van alle disciplines inclusief geesteswetenschappen en sociale wetenschappen is hierbij essentieel. Dit was ook één van de belangrijkste conclusies van de bijeenkomsten. Deze gaven aan dat de volgende acties noodzakelijk zijn om de integratie te bevorderen:

- leg en verstevig de contacten tussen de verschillende disciplines en stimuleer de uitwisseling van kennis en ervaring tijdens een workshop volgens het concept van het LC. Uitbreiding van de missie van het LC naar CS ondersteunt de TWINS Raad KNAW dan ook van harte;
- integreer CS op een gecoördineerde wijze in de bachelor- en masteropleidingen van alle relevante disciplines. Nu staat incompatibiliteit van de vooropleidingen multidisciplinaire samenwerking in de weg;
- verduurzaam de samenwerking tussen de disciplines door het opzetten van een onderzoeksprogramma gericht op multidisciplinaire samenwerking op het gebied van CS. Expliciet wordt hierbij gedacht aan een disciplineoverstijgend NWO programma op het gebied van CS.

Om de integratie tussen de disciplines via deze acties optimaal te laten verlopen, is coördinatie belangrijk. De TWINS Raad KNAW steunt het NWO initiatief tot het instellen van een Netherlands Council for Computational Science dan ook van harte.

Dit initiatief sluit uitstekend aan bij de visies recent ontwikkeld door ICT Regie en de Council kan een grote rol spelen bij de invulling van de ICT onderzoeksagenda.

Wel pleit de TWINS Raad KNAW voor een evenwichtige samenstelling van de Council waar alle relevante disciplines inclusief geesteswetenschappen en sociale wetenschappen bij betrokken worden.

Omdat zowel de beoogde voorzitter van de in te stellen Council als het participerende ACMM uit een onderzoeksterrein komen waarin vooral het CECAM sterk is, is het raadzaam meerdere vice-voorzitters te benoemen om draagvlak te creëren voor de beoogde verbreding.



Deze Council kan een belangrijke rol spelen bij de coördinatie van voornoemde acties. Wij hopen dat de Council met name aandacht schenkt aan de volgende aspecten:

- aansluiting van de thema's van de workshops van het LC op de nationale en internationale onderzoeksagenda;
- coördinatie van de op CS gerichte bachelor- en masteropleidingen tussen de verschillende disciplines onderling en aansluiting hiervan op de nationale en internationale onderzoeksagenda's en het op CS gerichte multidisciplinaire onderzoeksprogramma;
- begeleiding van het op CS gerichte multidisciplinaire onderzoeksprogramma en aansluiting hiervan op de nationale en internationale onderzoeksagenda en de vooropleiding;
- coördinatie van de nationale onderzoeksagenda (gericht op zowel mono- als multidisciplinaire onderzoeksthema's en algoritme en software ontwikkeling in het kader van nieuwe hardware ontwikkelingen) en aansluiting op de internationale onderzoeksagenda's.

Uit de bijeenkomsten is een aantal onderzoeksthema's naar voren gekomen dat speciale aandacht verdient. Met name bij de in toenemende mate voorkomende spatio-temporele vraagstukken speelt CS een sleutelrol. Dit wordt in het advies nader uitgewerkt;

- stimuleren en coördineren van internationale uitwisseling op zowel onderzoek- als opleidingsniveau. Dit is nu uitstekend te realiseren via de Nederlandse node van het CECAM.

In het advies, dat de TWINS Raad KNAW momenteel voorbereidt, wordt de concrete invulling van de voornoemde aanbevelingen uitgewerkt. Deze brief loopt vooruit op dit advies, dat voortbouwt op de bij de KNAW verschenen verkenning "Biomathematics. A vision for Success". Vanwege de urgentie van onderhavige kwestie is deze brief, na ruggespraak met het bestuur van de KNAW, niet langs de reguliere KNAW kanalen geaccordeerd, maar op gezag van de voorzitter van de TWINS Raad KNAW aan U geadresseerd.

Hoogachtend,

Prof. dr. R.A. van Santen
Voorzitter TWINS Raad KNAW

Kopie aan:

Prof. dr. R.H. Dijkgraaf, president KNAW

Dr. K.H. Chang, directeur algemene zaken en bedrijfsvoering KNAW

Prof. dr. ir. R. Rabbinge, voorzitter Raad voor Aard- en Levenswetenschappen KNAW

Bijlage: Rapportage adviestraject, leden werk-/schrijfgroep

Rapportage adviestraject Computational Sciences TWINS Raad

Inleiding

Nederland heeft een sterke uitgangspositie om internationaal te excelleren op het gebied van Computational Sciences (CS) maar synergie tussen de verschillende ontwikkelingen ontbreekt waardoor op tal van gebieden dubbel werk gedaan wordt, dan wel niet over de meest geavanceerde simulatietechnieken beschikt wordt. Uitwisseling van ervaringen en bundeling van krachten is van groot belang. Vanuit het onderzoeksveld, vertegenwoordigd door een aantal partijen (Universiteiten, 3TU's, Stichting Nationale Computer Faciliteiten (NCF), ICT-Regie, SURF, NWO, Lorentz Center, Amsterdam Center for Multiscale Modeling (ACMM), programmacommissie Computational Humanities KNAW) is aandacht voor deze problematiek gevraagd.

Om de problematiek helder te krijgen, heeft de TWINS Raad op 13 januari 2009 een rondetafel bijeenkomst georganiseerd waaraan 17 deskundigen uit verschillende vakgebieden deelnamen. De in deze bijeenkomst geïdentificeerde problemen en punten van aandacht zijn tijdens een vervolgworkshop op 2 juni 2009 uitgewerkt. Aansluitend vond op 4 juni de bijeenkomst Computational Humanities plaats waaraan 50 deskundigen deelnamen. Omdat deze bijeenkomst zich op dezelfde problematiek richtte, zijn in overleg ook de uitkomsten hiervan meegenomen in het adviestraject.

In deze rapportage doen we verslag van de voortgang van het adviestraject. Behaalde resultaten lichten we toe en we schetsen het vervolgtraject. Tevens lichten we het begrip Computational Sciences nader toe.

Resultaten

Tijdens de bijeenkomsten zijn door de betrokkenen in het veld tal van acties naar voren gebracht om de krachten te bundelen. De acties zijn te groeperen rond de volgende thema's:

- leggen en verstevigen van contacten tussen de verschillende vakdisciplines op (under)graduate en post-graduate niveau en uitwisseling van kennis en ervaring stimuleren. Workshops volgens het concept van het Lorentz Center lenen zich hier goed toe;
- integreren CS in de curricula van de vakdisciplines. Nu staat incompatibiliteit van de vooropleidingen multidisciplinaire samenwerking in de weg;
- opzetten van een discipline overstijgend multidisciplinair onderzoeksprogramma gericht op CS om de samenwerking te verduurzamen;
- opstellen van een brede programma-adviesraad op het gebied van CS om de integratie tussen de disciplines via deze acties op gecoördineerde wijze te laten verlopen;
- verdere versterking van de hard- en software-infrastructuur.

Er is afstemming gezocht met ICT-Regie dat een advies voorbereide voor NWO over het te voeren beleid op het gebied van de ICT infrastructuur. Hierin wordt onder meer gepleit voor het oprichten van een e-Science Research Center dat nieuwe methoden ontwikkelt voor wetenschapsbeoefening met ICT en de synergie tussen methoden voor de diverse disciplines bevordert.

Tijdens de vergadering van de werkgroep CS (zie bijlage) op 3 september 2009 bleek dat, vooruitlopend op een definitief KNAW-advies, met spoed een voorlopig advies aan NWO uitgebracht moest worden aangezien er de week daarop besluiten over de plannen op dit terrein genomen zouden worden bij NWO n.a.v. de aanbidding van het advies van ICT-Regie. In nauw overleg met een aantal leden van de werkgroep is daarom een door de voorzitter van de TWINS-Raad ondertekende brief opgesteld met daarin de hoofdpunten van het adviestraject, welke door NWO positief ontvangen is. Deze brief van d.d. 10 september 2009 ontvangt u samen met deze rapportage.

De brief heeft direct tot resultaten geleid. De missie van het Lorentz Center is uitgebreid naar CS en NWO heeft de National Committee Computational Science (NCCS) ingesteld. De brief samen met de workshops hebben een grote rol gespeeld bij de verbreding van deze Raad. Mede dankzij deze acties hebben nu alle gebiedsbesturen hun steun toegezegd. Dit is cruciaal omdat juist kruisbestuiving en onderzoek op

grensgebieden tot grote doorbraken kan leiden. Een belangrijke taak van het NCCS is dan ook het bevorderen van de multidisciplinaire samenwerking, die ook in e-Science een grote rol speelt. Ook is de positie van Computational Sciences nu goed afgebakend t.o.v. initiatieven van ICT-Regie en de NCF (zie "Advies over de concrete invulling van een op te richten e-SRC", september 2009, ICT-Regie en "Kabinetsvisie supercomputers en supernode in Nederland" waarin CS nu een afgebakende positie heeft). Het op te richten e-Science Research Center zal een grote rol spelen bij de verdere versterking van de hard- en software-infrastructuur.

Door het sturen van de brief naar NWO om het advies aan te kondigen, is het adviestraject in een stroomversnelling geraakt. Omdat een groot aantal aanbevelingen is overgenomen, ziet de TWINS Raad af van verdere uitwerking in de voorheen beoogde vorm. In plaats daarvan heeft het KNAW Bestuur de brief zelf de status van (brief)advies gegeven.

Vervolgtraject

De aanbevelingen van de werkgroep die resteren, strekken zich uit over onderzoek, onderwijs en organisatie.

Onderzoek

Er is een structurele financiering van jaarlijks multidisciplinair CS onderzoek in Nederland nodig. De NWO breed gesteunde NCCS kan als klankbordgroep dienen.

Onderwijs

Uit een eerste verkenning van Nationale onderwijsinitiatieven¹ blijkt dat verdere afstemming en versterking van onderwijs op het gebied van CS in Nederland noodzakelijk is waarbij het multi-disciplinaire karakter van de CS zowel voor wat betreft de inhoud als ook de instroom van de opleidingen tot zijn recht moet komen. Aansluiting bij internationale onderwijsinitiatieven zoals die nu genomen worden door NSF (USA) en de EU is essentieel.

Organisatie

Verdere landelijke afstemming met de VSNU, ICT-Regie en de NCF is noodzakelijk. Het verdient aanbeveling hiertoe vanuit de KNAW een intermediair aan te wijzen die dit proces begeleidt en bewaakt.

De TWINS Raad zal in overleg met de NCCS bepalen welke rol zij kan spelen bij mogelijke vervolgcacties.

Toelichting begrip Computational Sciences

Computational Sciences (CS) is een snel groeiend multidisciplinair onderzoeksgebied waarbij geavanceerde computationele modellen en data-analyses worden aangewend om wetenschappelijke en maatschappelijke problemen op te lossen. Het berekenbaar maken en simuleren van complexe processen heeft inmiddels een niveau bereikt waardoor CS de traditionele pilaren van theorie, experimenteren en observatie waardevol complementeert. Eén van de moderne grote uitdagingen ligt in het door middel van computersimulatie begrijpen van processen die zich uitstrekken over vele ruimte – en tijdschalen².

Nederland heeft een sterke onderzoekstraditie in computersimulaties toegepast in de natuurwetenschappen (zoals computational physics, -chemistry, -biology). Moderne experimentele technieken ontsluiten een rijkdom aan gedetailleerde informatie welke direct en vaak algemeen beschikbaar is. Dit opent vele nieuwe mogelijkheden voor de computationele wetenschappen. Ook buiten de natuurwetenschappen komt steeds meer en gedetailleerde informatie beschikbaar voor modelbouwers (bijvoorbeeld t.b.v. computational finance, -sociology, -law, -linguistics). Met deze informatie kunnen verrassend realistische computersimulaties gedaan worden die inzicht bieden in onderliggende mechanismen en waarmee allerlei scenario's kunnen worden doorgerekend. Hierdoor kunnen kostbare of zelfs onwenselijke en onmogelijke experimenten worden vermeden.

¹ Aan de 3TU's (binnen toegepaste wiskunde master programma's), in Groningen en Utrecht (scientific computing) en Amsterdam (de Internationale Master Computational Science, internationale initiatieven van de Nederlandse node van het CECAM i.o.).

² Zie bijvoorbeeld Amsterdam Center for Multiscale Modelling (<http://www.acmm.nl/>)


De ontwikkelingen zijn de laatste 15 jaar bijzonder hard gegaan en zullen naar verwachting de komende jaren in verschillende wetenschapsgebieden kansen bieden op grote doorbraken. Dit blijkt ondermeer uit het nationale rapport "Computational e-Science: Studying complex systems in silico"³ en het USA rapport "Simulation-based Engineering & Science"⁴. Daarnaast wordt het onderzoeksparadigma Computational Sciences inmiddels international erkend; tijdschriften⁵ en conferenties⁶ dragen hier verder aan bij.

Het is goed op te merken dat doorbraken op tal van terreinen al hebben plaatsgevonden. Zonder moderne computersimulaties geen ruimtevaart, klimaatstudies, weersvoorspelling, chemisch structuuronderzoek, gentechnologie en nog veel meer.

Het ontwerpen van de computermodellen, inclusief de benodigde geavanceerde rekentechnieken en inbreng vanuit de verschillende vakdisciplines, vergt vele mensjaren en is voor een groot aantal onderzoeksgroepen niet op te brengen. Omdat (aspecten van) deze kennis overdraagbaar en uitwisselbaar zijn, is bundeling van krachten dringend noodzakelijk.

CS is veelal applicatiegedreven en staat daardoor in nauwe verbinding met e-Science. Computer infrastructuur, koppeling van databases, grids, virtual labs, generieke algoritmen etc. zijn onderdeel van het e-Science paradigma. Dat verschaft de basis voor de applicatie aspecten van CS. Hierbij richt CS zich op de specifieke simulaties terwijl het e-Science Research Center zorg draagt voor de infrastructurele en generieke e-Science aspecten.

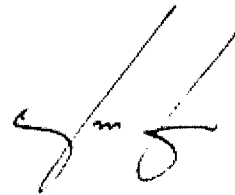
Het ontrafelen van het genoom, chemische structuuranalyses, het gedrag van veeldeeltjes-systemen, weersvoorspelling, stromingsverschijnselen, verkeerssimulatie etc., met specifieke wiskundige modellen en technieken is typisch het domein van de CS. Het is duidelijk dat e-Science enabling is voor de CS.



Henk A. van der Vorst



Rutger A. van Santen



Peter M.A. Sloot

³ P.M.A. Sloot; D. Frenkel; H.A. Van der Vorst; A. van Kampen; H.E. Bal; P. Klint; R.M.M. Mattheij; J. van Wijk; J. Schaye; H.-J. Langevelde; R.H. Bisseling; B. Smit; E. Valenteyn; H.J. Sips; J.B.T.M. Roerdink and K.G. Langedoen: Computational e-Science: Studying complex systems in silico. A National Coordinated Initiative. White Paper (<http://www.science.uva.nl/research/pacs/papers/archive/Sloot2007a.pdf>) February 2007.

⁴ Tinsley Oden et al., Report of the National Science Foundation Blue Ribbon Panel on Simulation-Based Engineering Science Simulation Based Engineering Science, (www.nsf.gov/pubs/reports/sbes_final_report.pdf), May 2006

⁵ Naast discipline specifieke tijdschriften zoals in Computational Physics, - Chemistry, en toegepaste wiskunde, zijn er domein brede international tijdschriften, zoals The Journal of Computational Science (Elsevier Science Publishers, www.elsevier.com/locate/jocs), Computing in Science & Engineering (IEEE and AIP, <http://www.computer.org/portal/web/cise/home>).

⁶ Naast discipline specifieke zijn er domein brede conferenties, zoals the International Conference on Computational Science (<http://www.iccs-meeting.org/>) en de SIAM conference on Computational Science and Engineering (<http://www.siam.org/meetings/cse09/>).

Werk-/schrijfgroep adviestraject Computational Sciences TWINS Raad

Naam	Organisatie	
Prof. dr. Matthias Bickelhaupt	Vrije Universiteit Amsterdam	
Prof. dr. Arjen Doelman	Centrum voor Wiskunde en Informatica	
Prof. dr. Daan Frenkel	FOM-AMOLF	
Prof. dr. H. Jaap van den Herik	TiCC, Universiteit van Tilburg	
Prof. dr. Jan Karel Lenstra	Centrum voor Wiskunde en Informatica	
Prof. dr. Simon F. Portegies Zwart.	Sterrewacht Leiden Universiteit	
Prof. dr. ir. Wim van Saarloos	Lorentz Center Leiden Universiteit tot 1 november 2009	lid tot 1 november 2009
Prof. dr. Peter M.A. Sloot, voorzitter	Universiteit van Amsterdam	
Prof. dr. Bas Teusink	Vrije Universiteit Amsterdam	
Prof. dr. ir. Jaap J.W. van der Vegt	Universiteit Twente	
Prof. dr. Henk .A. van der Vorst	Universiteit Utrecht	
Adviserende lid		
Dr. P. Aerts	NWO-NCF	
q.q. aanwezig		
Prof. dr. Rutger A. van Santen voorzitter TWINS Raad	Technische Universiteit Eindhoven	