

Computersimulationen in der modernen theoretischen Physik

KOMBINATION VON

NUMERISCHEN SIMULATIONEN MIT ANALYTISCHEN RECHNUNGEN

Im 20. Jahrhundert leisteten einige Wissenschaftler Pionierarbeit auf dem Gebiet der Computersimulation. Sie erarbeiteten Methoden, die es erlaubten komplizierte mehrdimensionale Wahrscheinlichkeitsverteilungen auszuwerten. Diese Entwicklung der Computer und der Simulationstechniken waren von großer Bedeutung für die physikalische Forschung der letzten 30 bis 40 Jahre. In der Physik haben besonders die Gebiete der nichtlinearen Dynamik und der statistischen Physik von den Simulationen profitiert.

Bis Mitte des 20. Jahrhunderts war das vorrangige Ziel der Physik die Beschreibung der Natur durch »analytische« mathematische Formeln und Gesetze.

Diese Formeln sollten einfach genug sein, um Aussagen über physikalische Vorgänge machen zu können, die entweder vorhandene experimentelle Daten erklären oder neue physikalische Phänomene vorhersagen konnten. Bei der Berechnung der Formeln halfen Tabellen mathematischer Funktionen, beginnend bei den 1614 veröffentlichten logarithmischen Tabellen von J. Napier. Im Jahr 1621 erfand E. Gunter das »Logarithmenlineal«, bei dem die Multiplikation zweier Zahlen durch eine einfache Längenaddition durchgeführt wurde.

Einer der Autoren dieses Artikels war im Besitz einer Tabelle der Produkte natürlicher Zahlen von 1 bis 1.000.000, die in der ehemaligen Sowjetunion in den späten 50er Jahren veröffentlicht wurde.

Seit dem Beginn der modernen Naturwissenschaften träumten viele Wissenschaftler von »schnellen Rechenmaschinen«. Die ersten Prototypen wurden im 17. Jahrhundert unter anderem von B. Pascal und G. W. Leibniz konstruiert.

Das Konzept der modernen Computer wurde 1833 von Ch. Babbage beschrieben.

Die Realisierung ließ jedoch noch ein Jahrhundert auf sich warten.

Zwischen 1936 und 1938 baute Conrad Zuse die vielleicht erste computerähnliche Rechenmaschine Z1. Die Z1 funktionierte rein mechanisch. In den späteren Versionen Z2, Z3 und Z4 benutzte Zuse Telefonrelais als Schalter. Besser bekannt wurde jedoch der 1944 vom amerikanischen Wissenschaftler H. Aiken gebaute elektromechanische Computer MARK I sowie der wenig später, im Jahr 1946, von J. Mauchly und J. P. Eckert gebaute erste elektronische Computer, die ENIAC (»Electronic Numerical Integrator and Calculator«). Die ENIAC bestand aus 18.000 Vakuumröhren. Seitdem verlief die Weiterentwicklung der Computer in einer immensen Geschwindigkeit.

Im 20. Jahrhundert leisteten einige Wissenschaftler Pionierarbeit auf dem Gebiet der Computersimulation.

Unter ihnen waren S. Ulam und J. von Neuman, die schon während des Manhattan-Projekts eine Monte-Carlo-Methode erarbeiteten, die es erlaubte, komplizierte mehrdimensionale Wahrscheinlichkeitsverteilungen auszuwerten.

Die Entwicklung der Computer und der Simulationstechniken waren von großer Bedeutung für die physikalische Forschung der letzten 30 bis 40 Jahre.

In der Physik haben besonders die Gebiete der nichtlinearen Dynamik und der statistischen Physik von den Simulationen profitiert.

Die nichtlineare Dynamik beschreibt Systeme, die sich zeitlich in einer »nichtlinearen« Weise entwickeln. »Nichtlinear« bedeutet, dass die Auswirkungen einer Störung des Systems nicht proportional zur Stärke der Störung, sondern komplizierterer Natur sind.

Selbst einfache nichtlineare Systeme mit einer kleinen Zahl von Freiheitsgraden (die Zahl der Variablen, durch die ein Zustand eindeutig bestimmt wird) können sehr komplexe Bewegungen ausführen.

Eine Besonderheit sind chaotische Systeme, bei denen selbst kleinste Störungen zu immer größeren Störungen anwachsen.

Bis zum Ende des 19. Jahrhunderts wurden nur »integrierbare« Systeme betrachtet. »Integrierbar« bedeutet, dass man den Zustand des Systems zu einem beliebigen Zeitpunkt durch die Berechnung einer analytischen, mathematischen Formel erhalten kann.

Vielleicht war H. Poincaré der erste, der darauf hinwies, dass die meisten physikalischen Modelle gar nicht integrierbar sind und daher nicht in einer solchen einfachen Formel beschrieben werden können.

Solche »nicht integrierbaren« Systeme konnten zur damaligen Zeit noch nicht oder nur sehr oberflächlich untersucht werden. Eine tiefere Untersuchung war erst mit modernen Computern möglich und ermöglichte das Forschungsgebiet des deterministischen Chaos. In diesem

Gebiet wurden und werden Simulationen hauptsächlich eingesetzt, um Gesetzmäßigkeiten zu entdecken, die anschließend analytisch beschrieben werden sollen.

Die statistische Physik behandelt Systeme aus sehr vielen Elementen, wie z.B. Gase oder Flüssigkeiten, die aus Atomen oder Molekülen bestehen.

Obwohl die einzelnen Elemente und die Wechselwirkungen zwischen ihnen sehr einfach sein können (oder zumindest durch einfache Gleichungen beschrieben werden können), ist die Dynamik des ganzen Systems durch die große Zahl der Elemente oft sehr komplex (die typische Anzahl der Elemente liegt zwischen einigen tausend und der Avogadrokonstante, $6 \cdot 10^{23}$).

Die Beschreibung eines solchen Systems geschieht durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zustände des Systems.

Die Zahl der Zustände ist dabei sehr groß und übersteigt im allgemeinen die verfügbare Computerleistung. Hier schafft die oben erwähnte Monte-Carlo-Methode Abhilfe, die auf schnellen Computern keine exakten Ergebnisse, aber doch recht gute Näherun-

gen liefert (und auf unendlich schnellen Rechnern exakte Ergebnisse liefern würde).

Computersimulationen spielen in der statistischen Physik jedoch keine so große Rolle wie in der nichtlinearen Dynamik, weil in der statistischen Physik viele Vorgänge auch analytisch beschrieben werden können. Daran waren insbesondere die Nobelpreisträger K. G. Wilson und P. W. Anderson beteiligt.

Eine der ersten Computersimulationen in der Physik wurde von E. Fermi, J. Pasta und S. Ulam durchgeführt, um ein wichtiges Prinzip der statistischen Mechanik zu testen: das sogenannte Ergodenprinzip.

Das Ergodenprinzip ermöglichte es, wichtige Größen eines komplizierten Systems zu finden, ohne das gesamte Problem lösen zu müssen; es reichen statt dessen einige Annahmen über die Wahrscheinlichkeiten der Zustände.

Das Ergodenprinzip hätte ohne die Hilfe von Computern nicht getestet werden können.

Trotz der spektakulären Erfolge gibt es unter den Physikern auch skeptische Meinungen zu

Computersimulationen. Die Anhänger des bedeutendsten russischen Theoretikers des letzten Jahrhunderts, L. D. Landau, betrachteten Simulationen als ein sekundäres Hilfsmittel oder gar als eine Schande für die »analytische Theorie«.

Solche extremen Sichtweisen sind sicher übertrieben, aber nicht einfach unter den Tisch zu kehren. Es ist leicht, eine große Zahl von Simulationsergebnissen und bunten Bildern zu produzieren. Ohne ein physikalisches Verständnis des Vorgangs bleiben solche Simulationen jedoch für die Wissenschaft bedeutungslos. Auch ist die Gefahr groß, falsche Ergebnisse zu bekommen, wenn mit der Simulation nicht eine analytische Analyse einhergeht.

Natürlich kennen die Physiker am Institut für theoretische Physik der Universität Hannover diese Gefahren und kombinieren numerische Simulationen mit analytischen Rechnungen, um existierende experimentelle Daten zu erklären oder neue Phänomene vorherzusagen.

Die beiden Abbildungen zeigen die Ergebnisse eines experimentellen Versuchs (Abbil-

Trotz spektakulärer Erfolge gibt es unter den Physikern aber auch skeptische Meinungen zu Computersimulationen. Die Physiker am Institut für theoretische Physik der Universität Hannover kennen die Gefahren und kombinieren numerische Simulationen mit analytischen Rechnungen, um existierende experimentelle Daten zu erklären oder neue Phänomene vorherzusagen.

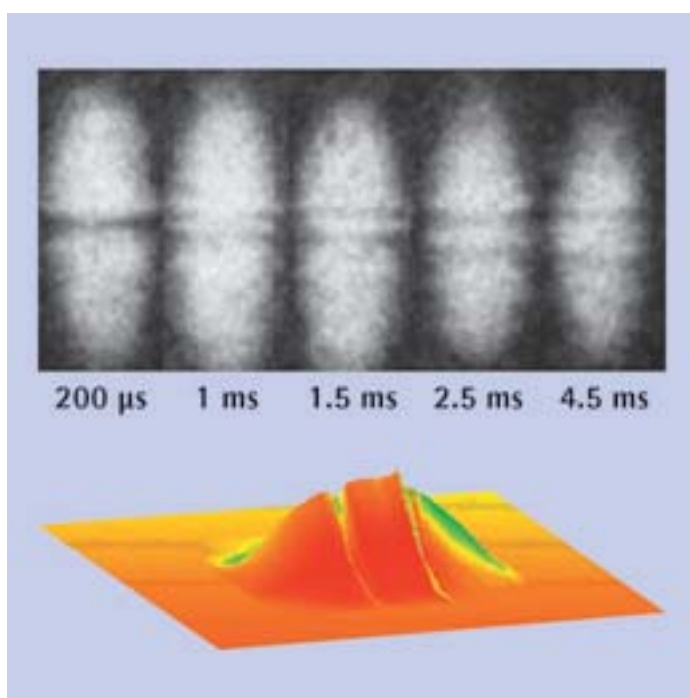


Abbildung 1
1a (oben): Experimentelle Beobachtung von dunklen Solitonen.
1b (unten): Simulation des entsprechenden Vorgangs. Auch hier sind die Solitonen als Dichteminima zu erkennen.

derung 1a) sowie numerischer Simulationen (Abbildung 1b und 2) an einem Bose-Einstein-Kondensat (BEC).

Wenn eine Wolke von bosonischen Atomen in einer (magnetooptischen) Falle gefangen ist und auf eine Temperatur nahe des absoluten Nullpunkts abgekühlt wird, zeigt diese Wolke neue Eigenschaften. Es entsteht eine Art neuer Aggregatzustand, das BEC. Zu sehen sind Wolken von etwa 100.000 Atomen. Vorhergesagt wurde das BEC zuerst 1925 von dem indischen Theoretiker S. Bose und von

Durch die Wechselwirkung der Atome (die Atome können sich gegenseitig anziehen oder abstoßen) können Wellen erzeugt werden, darunter »Solitonen« genannte Wellen: Dichteminima oder -maxima, die sich durch das BEC bewegen.

Die erste experimentelle Beobachtung eines dunklen Solitons, also eines Dichteminimums, gelang 1999 den Physikern um W. Ertmer (Abbildung 1a) im Institut für Quantenoptik der Universität Hannover.

Simulationen des entsprechenden Vorgangs, die von

die ein ähnliches Experiment durchführte.

Abbildung 2 zeigt die Simulation eines Vorgangs, der noch auf eine experimentelle Realisierung wartet. Zu sehen ist ein rotierendes BEC.

Durch die Rotation entsteht ein Wirbel in der Mitte. Wirbel tauchen an vielen Stellen in unserem Alltag auf, z.B. in der Badewanne beim Ablassen des Wassers. In der Simulation wird ein solches BEC aus der Falle entlassen (1). Unter Einwirkung der Gravitation fällt es nach unten und wird an

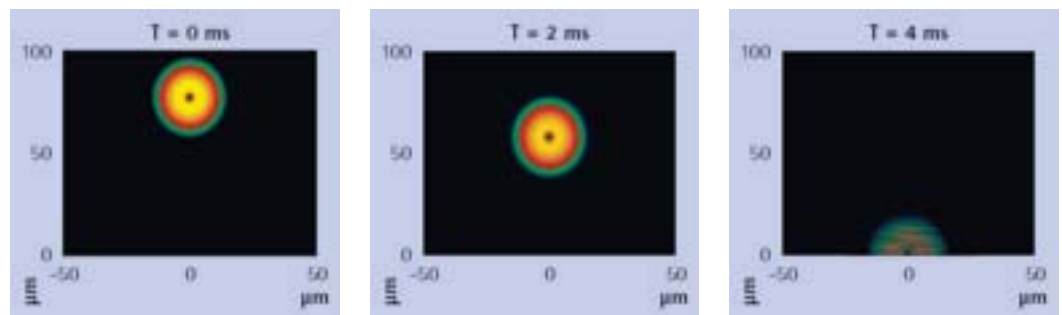
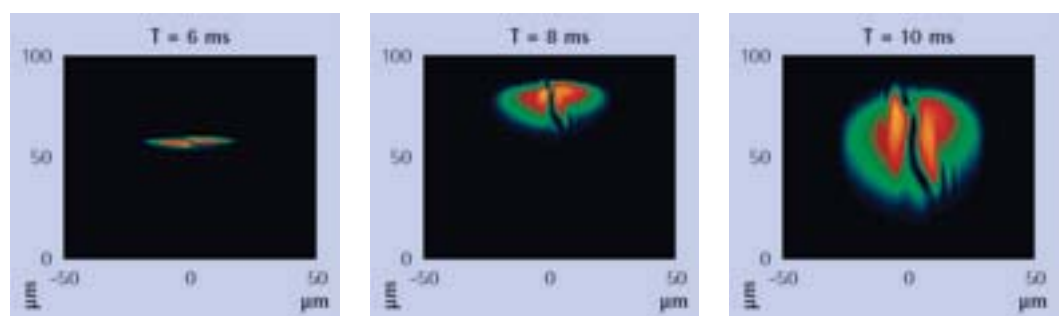


Abbildung 2
Simulation eines Bose-Einstein-Kondensats

Die Farben kennzeichnen die Dichte des Kondensats (Gelb = hohe, Blau = niedrige Dichte). Das erste Bild ($T = 0 \text{ ms}$) zeigt das Kondensat direkt nach der Erzeugung in einer Falle. Deutlich zu erkennen ist ein Wirbel in der Mitte des Kondensats als ein Punkt geringer Dichte. Die Falle wird bei $T = 0 \text{ ms}$ abgeschaltet. Das Kondensat fällt im Gravitationsfeld nach unten. Bei $T = 4 \text{ ms}$ wird das Kondensat an einem Spiegel reflektiert, der sich am unteren Bildrand befindet. Diese Reflexion bewirkt eine kurzfristige Abflachung bei $T = 6 \text{ ms}$. Eine durchgehende Linie geringer Dichte durchzieht anschließend das Kondensat und teilt es in zwei Hälften.



A. Einstein. Die erste experimentelle Realisierung eines BEC ließ jedoch bis 1996 auf sich warten und wurde im letzten Jahr mit dem Nobelpreis für die amerikanischen Physiker E. Cornell und C. Wieman sowie für den in den USA forschenden deutschen Physiker W. Ketterle geehrt.

den Physikern um M. Lewenstein im Institut für theoretische Physik der Universität Hannover durchgeführt wurden, sind in Abbildung 1b zu sehen. Die Veröffentlichung der experimentellen Daten sowie der theoretischen Analyse gelang uns ein paar Wochen vor der Gruppe um den Nobelpreisträger W. Phillips,

einem »Spiegel« reflektiert. Als ein solcher Spiegel kann im Experiment Laserlicht dienen, und in der Tat wurde eine Reflexion von einem BEC schon in der Gruppe um W. Ertmer durchgeführt.



Prof. Dr. Maciej Lewenstein

Jahrgang 1955, ist Leiter der Abteilung Theoretische Quantenoptik des Instituts für Theoretische Physik.



Dipl.-Phys. Łukasz Dobrek

Jahrgang 1976, ist Doktorand in der Abteilung Theoretische Quantenoptik des Instituts für Theoretische Physik.



Ingo Josopait

Jahrgang 1977, ist Diplomand in der Abteilung Theoretische Quantenoptik des Instituts für Theoretische Physik.

Die Dynamik solcher reflektierten BECs ist recht komplex und zeigt mehrere fundamentale Effekte wie Selbst-Interferenz der Materiewellen (3) und die Erzeugung einer Soliton-ähnlichen Struktur (4).

Es gibt heute eine doppelte Beziehung zwischen der Physik und der Informatik. Einerseits profitiert die Physik von den Computersimulationen. Andererseits treibt die Physik die Entwicklung der Computer voran.

Diese Verknüpfung könnte innerhalb der nächsten 15 bis 20 Jahre noch enger werden.

Bis jetzt behandeln die Informatiker ihre Programme unabhängig von der eingesetzten Hardware. Ein Programm ist also im Prinzip auf jedem Computer ausführbar, sofern dieser genug Speicher zur Verfügung stellt. Die Computer sind »klassisch«. Seit einigen Jahren wird jedoch von Physikern (auch am IQO und am ITP) und Informatikern an einer ganz anderen Art von Computern geforscht: den Quantencomputern. Solche

Computer könnten nach den Gesetzen der Quantenmechanik Informationen in einer völlig anderen Art bearbeiten.

Parallel arbeitende Programme könnten auf Quantencomputern deutlich schneller laufen als auf klassischen Computern. Bis heute ist es nur gelungen, recht kleine Quantencomputer mit höchstens 4 Quantenbits zu bauen.

Die Entwicklung besserer Quantencomputer könnte eine Revolution in der Informatik einleiten mit Konsequenzen, die schwer vorhersagbar, aber nicht zu unterschätzen sind.