

1 Computersimulation – eine Schlüsseltechnologie

Experiment, Modellbildung und numerische Simulation. In den Naturwissenschaften ist man bestrebt, die komplexen Vorgänge in der Natur möglichst genau zu modellieren. Der erste Schritt in diese Richtung ist dabei die Naturbeschreibung. Sie dient zunächst dazu, ein geeignetes Begriffssystem zu bilden. Die reine Beobachtung eines Vorganges erlaubt es allerdings in den meisten Fällen nicht, die ihm zugrundeliegenden Gesetzmäßigkeiten zu finden. Dazu sind diese zu kompliziert und lassen sich von anderen sie beeinflussenden Vorgängen nicht exakt trennen. Nur in seltenen Ausnahmefällen können aus reiner Beobachtung Gesetzmäßigkeiten abgeleitet werden, wie dies beispielsweise bei der Entdeckung der Gesetze der Planetenbewegung durch Kepler der Fall war. Statt dessen schafft sich der Wissenschaftler (so weit dies möglich ist) die Bedingungen unter denen der zu beobachtende Vorgang ablaufen soll selbst, das heißt, er führt ein Experiment durch. Dieses Vorgehen erlaubt es, Abhängigkeiten des beobachteten Ergebnisses von den im Experiment gewählten Bedingungen herauszufinden und so Rückschlüsse auf die Gesetzmäßigkeiten zu ziehen, denen das untersuchte System unterliegt. Das Ziel ist dabei die mathematische Formulierung der beobachteten Gesetzmäßigkeiten, also eine Theorie der untersuchten Naturerscheinungen. Meist beschreibt man dabei mit Hilfe von Differential- und Integralgleichungen, wie sich bestimmte Größen in Abhängigkeit von anderen verhalten und sich unter bestimmten Bedingungen über die Zeit ändern. Die resultierenden Gleichungen zur Beschreibung des Systems beziehungsweise des Prozesses bezeichnet man als mathematisches Modell.

Ein Modell, das sich bewährt hat, erlaubt es dann nicht nur, beobachtete Vorgänge präzise zu beschreiben, sondern ermöglicht auch, die Ergebnisse physikalischer Prozesse innerhalb gewisser Grenzen vorherzusagen. Dabei gehen die Durchführung von Experimenten, das Herauslesen von Gesetzmäßigkeiten aus den Ergebnissen von Messungen und die Übertragung dieser Gesetzmäßigkeiten in mathematische Größen und Gleichungen Hand in Hand. Theoretisches und experimentelles Vorgehen sind also aufs engste miteinander verknüpft.

Die Phänomene, die auf diese Art und Weise in Physik und Chemie untersucht werden, erstrecken sich über unterschiedlichste Größenordnungen. Sie finden sich auf den kleinsten bis zu den größten vom Menschen beobachtba-

ren Längenskalen, von der Untersuchung der Materie in der Quantenmechanik, bis hin zu Studien über die Gestalt des Universums. Dabei auftretende Größen bewegen sich vom Nanometer-Bereich (10^{-9} Meter) bei der Untersuchung von Eigenschaften der Materie auf molekularer Ebene bis hin zu Größenordnungen von 10^{23} Metern beim Studium von Galaxienhaufen. Entsprechend unterschiedlich sind auch die dabei auftretenden Zeitskalen, also die typischen Zeitintervalle, in denen die beobachteten Phänomene stattfinden. Sie erstrecken sich in den genannten Bereichen von 10^{-12} Sekunden bis hin zu 10^{17} Sekunden, also vom Piko- oder gar Femtosekundenbereich bis hin zu Zeitintervallen von mehreren Milliarden Jahren. Ebenso unterschiedlich sind die in den Modellen auftretenden Massen. Diese bewegen sich von 10^{-27} Kilogramm für einzelne Atome bis hin zu 10^{40} Kilogramm für ganze Galaxien.

Schon aus der Breite des Spektrums der beschriebenen Phänomene erkennt man, daß Experimente nicht immer auf die gewünschte Weise durchgeführt werden können. Darüber hinaus bestehen zum Beispiel in der Astrophysik nur wenige Möglichkeiten, durch Beobachtung und Experiment Modelle zu verifizieren und diese damit zu untermauern oder, im entgegengesetzten Fall, Modelle zu verwerfen, also zu falsifizieren. Andererseits sind die mathematischen Modelle, die die Natur hinreichend genau beschreiben, oft so kompliziert, daß keine analytische Lösung bestimmt werden kann. Deshalb wird üblicherweise ein neues, einfacher zu lösendes Modell entwickelt, dessen Gültigkeitsbereich dann im allgemeinen jedoch gegenüber dem ursprünglichen Modell eingeschränkt ist – man denke nur an die van der Waals-Gleichung zur Beschreibung dichter Gase oder die Boltzmann-Gleichung zur Beschreibung der Transporteigenschaften dünner Gase. Hierbei häufig verwendete Techniken sind Mittelungsverfahren, sukzessive Approximation, Matching-Methoden, asymptotische Analysis und Homogenisierung. Unglücklicherweise lassen sich jedoch viele entscheidende Phänomene nur mit den komplizierteren Modellen beschreiben. Damit können aber theoretische Modelle nur in einigen wenigen einfachen Fällen getestet und verifiziert werden. Als Beispiel denke man wieder an die Planetenbewegung und das in diesem Fall zwischen den Körpern herrschende Gravitationsgesetz. Bekanntermaßen können die aus diesem Gesetz resultierenden Bahnen nur für zwei Körper in geschlossener Form angegeben werden. Schon bei drei beteiligten Körpern existiert im allgemeinen keine geschlossene analytische Lösung mehr. Dies gilt erst recht für unser Planetensystem sowie für die Sterne unserer Galaxie.

Viele Modelle zum Beispiel in der Materialwissenschaft oder der Astrophysik bestehen aus vielen interagierenden Körpern (Partikeln), wie zum Beispiel Sternen und Galaxien oder Atomen und Molekülen. Die Zahl der Partikel kann sich dabei ohne weiteres in der Größenordnung von mehreren Millionen und mehr bewegen. Beispielsweise enthält jeder Kubikmeter Gas im Normalzustand (d.h. bei einer Temperatur von 273.15 Kelvin und

einem Druck von 101.325 Kilopascal) $2.686763 \cdot 10^{25}$ Moleküle (Loschmidt-Konstante). Die Menge von 12 Gramm des Kohlenstoffisotops C_{12} enthält $6.0221367 \cdot 10^{23}$ Moleküle (Avogadro-Konstante). Aber nicht nur auf mikroskopischer Ebene treten große Zahlen von Teilchen auf. Allein unsere Galaxie, die Milchstraße, besteht aus schätzungsweise 200 Milliarden Sternen. Ein Blick in den Sternenhimmel einer klaren Nacht gewährt die Erkenntnis, daß in solchen Fällen gar keine Hoffnung besteht, mit Papier und Bleistift eine Lösung der zugrundeliegenden Gleichungen zu bestimmen.

Dies sind einige der Gründe, warum sich neben dem praktischen und dem theoretischen Ansatz in letzter Zeit die *Computersimulation* als dritter Weg herausgebildet und sich mittlerweile zu einem unverzichtbaren Werkzeug für die Untersuchung und Vorhersage von physikalischen und chemischen Vorgängen entwickelt hat. In diesem Zusammenhang versteht man unter Computersimulation die mathematische Vorausberechnung technischer oder physikalischer Prozesse auf modernen Rechensystemen. Das folgende Vorgehen ist dabei charakteristisch: Aus der Beobachtung der Realität wird ein mathematisches – physikalisches Modell entwickelt. Die abgeleiteten Gleichungen, die in den meisten Fällen kontinuierlich in Zeit und/oder Raum gültig sind, werden nur noch an bestimmten ausgewählten Punkten diskret in Zeit und/oder Raum betrachtet. So wird zum Beispiel bei der Diskretisierung in der Zeit die Lösung der Gleichungen nicht mehr zu allen (d.h. unendlich vielen Zeitpunkten) gesucht, sondern sie wird nur an ausgewählten Punkten auf der Zeitachse betrachtet. Differentialoperatoren, wie zum Beispiel Zeitableitungen, lassen sich dann durch Differenzenoperatoren approximieren. In diesen Punkten werden die Lösungen der kontinuierlichen Gleichungen näherungsweise bestimmt. Je dichter die ausgewählten Punkte liegen, desto genauer kann die Lösung approximiert werden. Insbesondere die rasante Entwicklung der Computertechnologie, die zu einer enormen Steigerung der Leistungsfähigkeit sowohl bezüglich Rechenzeit als auch Speichergröße der Rechenanlagen geführt hat, erlaubt immer wirklichkeitstreuere Simulationen. Mittels geeigneter Visualisierungstechniken können dann die Resultate interpretiert werden. Liegen entsprechende Ergebnisse physikalischer Experimente vor, so können die Ergebnisse der Computersimulation mit diesen verglichen werden. Dies führt dann zu einer Verifizierung der Resultate oder zu einer Verbesserung des verwendeten Verfahrens oder des Modells, zum Beispiel durch geeignetes Anpassen von Parametern oder durch Abänderung der verwendeten Gleichungen. Einen schematischen Überblick über die Teilschritte der numerischen Simulation zeigt Abbildung 1.1.

Das heißt, auch für das Computerexperiment benötigt man ein mathematisches Modell, aber die Berechnungen werden nun auf einer Maschine näherungsweise durch das Ausführen eines Algorithmus vorgenommen. Damit lassen sich bedeutend kompliziertere und damit auch realistischere Modelle untersuchen, als dies auf analytischem Wege möglich ist. Darüber hinaus können kostspielige Versuchsaufbauten vermieden werden. Außerdem lassen

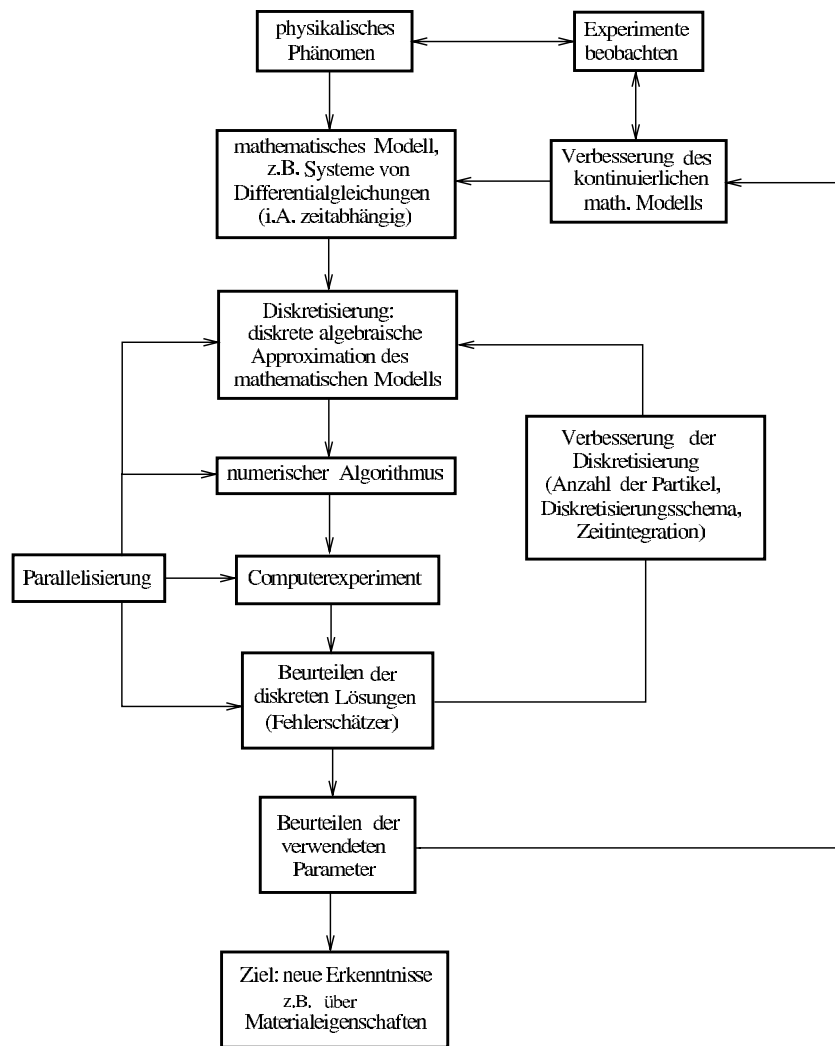


Abb. 1.1. Schematische Darstellung der typischen Vorgehensweise bei der numerischen Simulation.

sich Aussagen auch in Fällen treffen, die ansonsten wegen technischer Unzulänglichkeiten nicht realisierbar sind oder sich von vorneherein verbieten. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn Bedingungen im Labor schwer zu realisieren sind, Messungen nur schwer oder gar nicht durchführbar sind, Experimente zu lange dauern oder zu schnell ablaufen oder die Ergebnisse nur schwer zu interpretieren sind. Durch die Computersimulation ist es damit möglich, Zugang zu experimentell nicht untersuchbaren Phänomenen zu finden. Liegt ein zuverlässiges mathematisches Modell vor, das die entsprechende Situati-

on hinreichend genau beschreibt, so macht es im Computer – im Gegensatz zur Realität – im allgemeinen keinen Unterschied, ob ein Experiment bei einem Druck von einer Atmosphäre oder 1000 Atmosphären durchgeführt wird. Simulationen, die bei Raumtemperatur oder bei 10000 Kelvin ablaufen, lassen sich prinzipiell gleich behandeln. Experimente sind im μ -Meter- oder im Meterbereich durchführbar, untersuchte Phänomene können innerhalb von Femtosekunden ablaufen oder mehrere Millionen Jahren benötigen. Außerdem können Versuchsparameter leicht geändert werden, und es können zumindest näherungsweise Aussagen über Lösungen der zugrundeliegenden mathematischen Modelle gegeben werden.

Die numerische Simulation dient mittlerweile auch dazu, in Gebieten wie der Astronomie, in denen nur eine geringe Möglichkeit der Verifikation von Modellen besteht, Anhaltspunkte für die Korrektheit von Modellen zu geben. In der Nanotechnologie wiederum können Vorhersagen über neue, noch gar nicht real existierende Materialien gemacht werden, deren Eigenschaften können bestimmt und die am besten geeigneten Materialien identifiziert werden. Die Entwicklung geht hierbei in Richtung eines virtuellen Labors, bei dem die Stoffe im Computer aufgebaut und dort auf ihre Eigenschaften hin untersucht werden. Darüber hinaus bietet die Simulation die Möglichkeit, zur makroskopischen Charakterisierung dieser Materialien benötigte gemittelte Größen zu bestimmen. Insgesamt stellt das Computerexperiment damit die Verbindung zwischen Laborexperimenten und der mathematisch-physikalischen Theorie dar.

Jeder der Teilschritte eines Computerexperiments muß natürlich eine Reihe von Anforderungen erfüllen. So sollte zuallererst das mathematische Modell die Realität möglichst gut beschreiben. Im allgemeinen müssen hier Kompromisse zwischen der Genauigkeit und dem Aufwand bei der Lösung des mathematischen Modells eingegangen werden. Die Komplexität der Modelle führt in den meisten Fällen zu enormen Anforderungen an Speicherplatz und Rechenzeit, insbesondere wenn zeitabhängige Phänomene untersucht werden. Dann sind je nach Problemstellung mehrere geschachtelte Schleifen für die Zeitabhängigkeit, für das Anwenden von Operatoren oder auch für die Behandlung von Nichtlinearitäten abzuarbeiten.

Aktuelle Fragestellungen in der numerischen Simulation beschäftigen sich daher insbesondere mit der Entwicklung von Methoden und Algorithmen, die die Lösung der diskreten Probleme möglichst schnell bestimmen können (Multilevel- und Multiskalentechniken, Multipolverfahren, schnelle Fouriertransformation) und die mit möglichst geringem Speicheraufwand die Lösung des kontinuierlichen Problems gut approximieren können (Adaptivität). Realistischere und damit im allgemeinen komplexere Modelle erfordern schnellere, leistungsfähigere Algorithmen. Umgekehrt erlauben bessere Algorithmen die Verwendung komplexerer Modelle.

Eine weitere Möglichkeit, größere Probleme rechnen zu können, ist die Verwendung von *Vektorrechnern* und *Parallelrechnern*. Bei Vektorrechnern

wird die Steigerung der Leistungsfähigkeit durch das fließbandartige Abarbeiten gleichartiger arithmetischer Befehle für die in einem Vektor gespeicherten Daten erreicht. Bei Parallelrechnern werden einige Dutzend bis hin zu vielen tausend leistungsfähigen Prozessoren¹ zusammengeschaltet. Diese können gleichzeitig und unabhängig rechnen und zudem miteinander kommunizieren.² Dabei wird eine Verkürzung der Gesamtrechenzeit dadurch erzielt, daß die zu leistenden Berechnungen auf mehrere Prozessoren verteilt werden und somit, zumindest zu einem bestimmten Grad, gleichzeitig ausführbar werden. Darüber hinaus steht in einem parallelen Rechensystem meist ein wesentlich größerer Hauptspeicher zur Verfügung als bei sequentiellen Maschinen, so daß größere Probleme berechnet werden können. Als Beispiel sei hier mit dem ASCI Red System der erste Rechner genannt, der die Grenze von einem Teraflop/s Rechenleistung, das heißt einer Milliarde Gleitpunktoperationen pro Sekunde, durchbrochen hat. Dieser Rechner besitzt 9216 Prozessoren und wurde im Jahre 1996 im Rahmen der Accelerated Strategic Computing Initiative (ASCI) der USA realisiert. Diese dient dazu, im Laufe der Jahre eine Reihe von Supercomputern zu bauen, die 1, 3, 10, 30 und als Ziel 100 Teraflop/s (1 Teraflop/s bedeutet 10^{12} Gleitpunktoperationen pro Sekunde) Rechenleistung aufweisen. Die Fertigstellung des 100 Teraflop/s Rechners ist für das Jahr 2004 geplant.³ Der weltweit leistungsfähigste Rechner ist im Moment der Earth Simulator aus Japan, ein NEC SX-6 System bestehend aus 640 Knoten mit jeweils acht Vektorprozessoren und einer theoretischen Spitzenleistung von 40 Teraflop/s. Diese Rechner sind allerdings noch weit von einer Schreibtischtauglichen Größe entfernt. Der Earth Simulator zum Beispiel benötigt über drei Stockwerke den Platz von etwa drei Tennisplätzen.

Abbildung 1.2 zeigt die Entwicklung der Rechenleistung von Hochleistungsrechnern über die letzten Jahre gemessen mit dem parallelen Linpack-

¹ Die Prozessoren haben dabei heute meist eine RISC-Architektur (reduced instruction set computer). Sie besitzen eine gegenüber älteren Prozessoren reduzierte Zahl von Maschinenbefehlen, die ein schnelles fließbandartiges Abarbeiten der Befehle erlaubt, siehe [460].

² Um die Portierbarkeit von Programmen zwischen den Parallelrechnern unterschiedlicher Hersteller zu erlauben und das Vernetzen von Rechnern unterschiedlichen Typs zu einem Parallelrechner zu vereinfachen, werden einheitliche Regeln für den Datenaustausch zwischen Rechnern benötigt. Dabei hat sich in den letzten Jahren die Plattform MPI (Message Passing Interface) als de facto Standard für die Kommunikation zwischen den Prozessen herausgebildet, siehe Anhang A.3.

³ Auf diesen Computersystemen soll die Entwicklung von Software vorangetrieben werden, die unter anderem die Herstellung, Alterung, Sicherheit, Zuverlässigkeit, das Testen und die Weiterentwicklung des amerikanischen Nukleararsenals simuliert und damit real durchgeführte Atombombentests ersetzen soll. Ein zugrundeliegender Gedanke ist, daß die bei Atombombentests auftretenden Meßfehler relativ groß sind und dieselbe Genauigkeit in den nächsten Jahren auch auf Computern erreicht werden kann.

Benchmark⁴. Aufgetragen ist die Performance in Flop/s gegen die Jahreszahl und zwar für den jeweils weltweit schnellsten parallelen Rechner sowie die in der Liste der weltweit schnellsten parallelen Rechner (siehe [1]) an den Stellen 100 und 500 stehenden Computer. Auch Personalcomputer und Workstations erlebten in den letzten Jahren eine ähnliche Entwicklung ihrer Rechenleistung. Damit sind zufriedenstellende Simulationen auf diesen kleineren Rechnern aktuell möglich geworden.

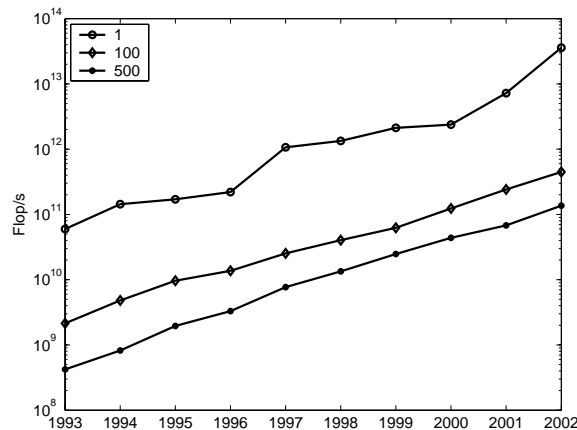


Abb. 1.2. Entwicklung der Rechenleistung über die letzten Jahre (paralleler Linpack Benchmark); schnellster (1), hundertstchnellster (100) und fünfhundertstchnellster Rechner (500); die Rechenleistung verzehnfacht sich bisher etwa alle vier Jahre.

Partikelmodelle. Ein wichtiger Bereich der numerischen Simulation befaßt sich mit sogenannten Partikelmodellen. Dies sind Simulationsmodelle, bei denen die Darstellung des physikalischen Systems diskret durch einzelne Teilchen (Partikel) und deren Wechselwirkung untereinander erfolgt. So lassen sich etwa klassische Systeme durch die Positionen, Geschwindigkeiten und Kraftgesetze der Teilchen beschreiben, aus denen sie bestehen. Dabei muß es sich bei Partikeln nicht, wie es die Bezeichnung nahelegen würde, um in ihrer Ausdehnung sehr kleine Körper oder Körper mit geringer Masse handeln. Vielmehr betrachtet man sie als die Grundbausteine eines abstrakten Modells. Es kann sich bei Partikeln deswegen sowohl um Atome oder Moleküle, als auch um Sterne oder Teile von ganzen Galaxien⁵ handeln. Die Parti-

⁴ Beim Linpack-Benchmark wird die Leistungsfähigkeit von Computern anhand der Lösung vollbesetzter linearer Gleichungssysteme mit der Gauß-Elimination getestet.

⁵ Diese werden meist gemittelt durch einige Massenpunkte beschrieben und nicht als Ansammlung von Milliarden von Sternen angesehen.

kel tragen dann Eigenschaften der physikalischen Teilchen, wie zum Beispiel Masse, Ort, Geschwindigkeit oder Ladung. Der Zustand beziehungsweise die Evolution des physikalischen Systems wird durch diese Eigenschaften der Partikel und die Wechselwirkungen zwischen ihnen beschrieben.⁶ Abbildung 1.3 zeigt das Ergebnis einer Simulation der Entstehung der großräumigen Struktur des Universums mit 32768 Partikeln, die jeweils einige hundert Galaxien repräsentieren. Abbildung 1.4 zeigt das Protein Nucleosome, das aus 12386 Partikeln besteht, die hier nun einzelnen Atomen entsprechen.

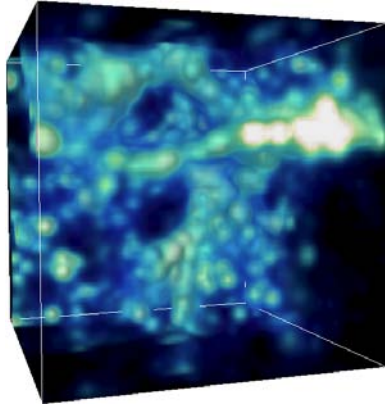


Abb. 1.3. Ergebnis einer Partikelsimulation der großräumigen Struktur des Universums.

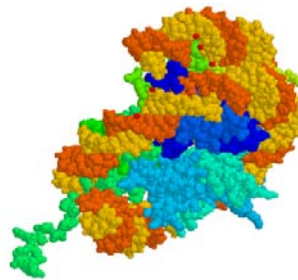


Abb. 1.4. Darstellung des Proteins Nucleosome.

In vielen Partikelmodellen werden die Gesetze der klassischen Mechanik verwendet, insbesondere das zweite Gesetz von Newton. Es handelt sich dabei um ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen zweiter Ordnung, das die Abhängigkeit der Beschleunigung der einzelnen Partikel von der auf sie wirkenden Kraft angibt. Die Kraft resultiert dabei aus der Interaktion mit den anderen Partikeln und hängt von deren Position ab. Ändert sich die Position der Partikel relativ zueinander, so ändert sich im allgemeinen auch die Kraft zwischen den Partikeln. Durch Lösen dieses Systems von gewöhnlichen Differentialgleichung erhält man dann bei vorgegebenen Anfangsbedingungen die Trajektorien der Partikel. Hierbei handelt es sich um ein deterministisches Verfahren, das heißt, bei gegebenem Anfangszustand des Systems sind im Prinzip die Trajektorien der Partikel für alle Zeiten eindeutig vorherbestimmt.

⁶ Neben den in diesem Buch betrachteten Methoden gibt es eine Reihe weiterer Ansätze, die unter dem Oberbegriff Partikelmethode eingeteilt werden können, siehe [442, 443], [144, 155, 376, 403], [252, 365, 389, 431] sowie [667, 668]. Auch lassen sich die sogenannten gitterlosen Diskretisierungsmethoden [55, 76, 192, 193, 267, 439] als Partikelverfahren interpretieren.

Wieso ist es aber überhaupt sinnvoll, die Gesetze der klassischen Mechanik zu verwenden, wo doch eigentlich, zumindest bei atomaren Modellen, die Gesetze der Quantenmechanik benutzt werden müßten und statt des Newtonschen Gesetzes die Schrödingergleichung als Bewegungsgleichung Verwendung finden müßte? Und was ist mit dem Ausdruck Wechselwirkung zwischen Teilchen überhaupt genau gemeint?

Betrachtet man beispielsweise ein System aus interagierenden Atomen bestehend aus Kernen und Elektronen, so läßt sich im Prinzip durch Lösen der Schrödingergleichung mit dem entsprechenden Hamiltonschen Operator das Verhalten des Systems vorherbestimmen. Jedoch ist eine analytische oder auch numerische Lösung der Schrödingergleichung bis auf wenige einfache Fälle nicht möglich, so daß Näherungen vorgenommen werden müssen. Der prominenteste Ansatz ist dabei die Born-Oppenheimer-Näherung. Sie ermöglicht eine Trennung der Bewegungsgleichungen der Kerne und der Elektronen. Die Vorstellung ist, daß die substantiell kleinere Masse der Elektronen es diesen erlaubt, sich sofort an die neuen Positionen der Kerne anzupassen. Die Schrödingergleichung für die Kerne wird dann durch die Newtonsche Bewegungsgleichung ersetzt. Die Kerne werden dabei klassisch bewegt, aber unter Verwendung von Potentialen, die sich aus dem Lösen der elektronischen Schrödingergleichung ergeben. Hierfür müssen Näherungen eingesetzt werden, die etwa mit Hilfe des Hartree-Fock-Ansatzes oder der Dichtefunktionaltheorie gewonnen werden (ab initio Moleküldynamik). Aus Komplexitätsgründen ist jedoch die Systemgröße auf wenige tausend Atome beschränkt. Eine weitere drastische Vereinfachung ist die Verwendung von parametrisierten analytischen Potentialfunktionen, die nur noch von den Positionen der Kerne abhängig sind (klassische Moleküldynamik). Die konkrete Potentialfunktion wird dann durch Anpassen an die Ergebnisse quantenmechanischer Elektronenstrukturrechnungen für einige repräsentative Modellkonfigurationen mit anschließendem Force-matching [206] oder durch das Anpassen an experimentell gemessene Daten gewonnen. Durch diese sehr grobe Approximation an die elektronische Potentialhyperfläche wird die Behandlung von Systemen mit vielen Millionen Atomen möglich. Quantenmechanische Effekte gehen dabei freilich weitgehend verloren.

Folgende unvollständige Zusammenstellung führt einige Beispiele physikalischer Systeme an, die durch Partikel sinnvoll dargestellt werden können und damit der Simulation durch Partikelmethoden zugänglich sind:

Festkörperphysik: Die Simulation von Materialien auf atomarer Ebene dient in erster Linie der Analyse bekannter und der Entwicklung neuer Materialien. Beispiele für untersuchte Phänomene sind die temperatur- oder schockinduzierte Strukturumwandlung in Metallen, die Bildung von Rissen in Bruchexperimenten angeregt durch Druck, Scherspannung usw., die Fortpflanzung von Schallwellen in Materialien, die Auswirkung von Defekten in der Struktur der Materialien auf ihre Belastbarkeit und die Analyse plastischer und elastischer Deformationen.

Fluidynamik: Partikelsimulationen ermöglichen einen neuen Zugang zur Untersuchung hydrodynamischer Instabilitäten auf der Mikroskala, wie der Rayleigh-Taylor- oder Rayleigh-Benard-Instabilität. Darüber hinaus ermöglichen es Moleküldynamik-Simulationen, komplizierte Fluide und Fluidgemische, wie zum Beispiel Emulsionen aus Öl und Wasser, oder auch Kristallisation und Phasenübergänge auf mikroskopischer Ebene zu untersuchen.

Biochemie: Die Dynamik von Makromolekülen auf atomarer Ebene ist eine der herausragenden Anwendungen für Partikelmethode. Heute ist man in der Lage, molekulare Flüssigkeiten, Kristalle, amorphe Polymere, flüssige Kristalle, Zeolite, Nukleinsäuren, Proteine, Membranen und vieles mehr zu simulieren.

Astrophysik: Hier dienen Simulationen insbesondere dazu, theoretische Modelle auf ihre Zuverlässigkeit hin zu überprüfen. Bei der Simulation der Entstehung der Struktur des Universums entsprechen die in der Simulation verwendeten Partikel ganzen Galaxien. Bei der Simulation von Galaxien hingegen repräsentieren die Partikel jeweils einige hundert bis tausend Sterne. Die zwischen den Partikeln wirkende Kraft ergibt sich aus dem Gravitationspotential.

Computersimulation von Partikelmodellen. Bei der Computersimulation von Partikelmodellen wird die Entwicklung eines Systems von interagierenden Partikeln über die Zeit durch Integration der Bewegungsgleichungen approximiert. Damit kann man die einzelnen Partikel verfolgen wie sie im Computer miteinander kollidieren, sich abstoßen, anziehen, wie mehrere Partikel aneinander gebunden sind, sich verbinden oder sich trennen. Es läßt sich feststellen, welche Abstände, Winkel usw. sich zwischen mehreren Partikeln einstellen. Daraus lassen sich dann relevante makroskopische Größen wie kinetische oder potentielle Energie, Druck, Diffusionskonstante, Transportkoeffizienten, Strukturfaktoren, Spektraldichten, Verteilungsfunktionen und vieles mehr berechnen.

Bei der Computersimulation werden zu bestimmende Größen meist nicht exakt sondern nur bis auf eine bestimmte Genauigkeit berechnet. Wünschenswert ist es deswegen

- mit einer gegebenen Anzahl von Operationen eine möglichst große Genauigkeit zu erzielen,
- eine vorgegebene Genauigkeit mit einer möglichst geringen Anzahl von Operationen zu erzielen, oder
- ein möglichst günstiges Verhältnis von Aufwand (Anzahl der Operationen) zu erzielter Genauigkeit zu erreichen.

Die letzte Variante schließt dabei offensichtlich die ersten beiden Formulierungen als Spezialfälle mit ein. Ein guter Algorithmus weist ein möglichst günstiges Verhältnis von Aufwand (Kosten, Anzahl der Operationen, Speicheranforderung) zu Nutzen (erreichte Genauigkeit) auf. Als Maßzahl für die

Beurteilung eines Algorithmus kann also der Quotient

$$\frac{\text{Aufwand}}{\text{Nutzen}} = \frac{\# \text{ Operationen}}{\text{erreichte Genauigkeit}}$$

dienen. Dies ist eine Zahl mit der verschiedene Algorithmen miteinander verglichen werden können. Weiß man, wie groß die Mindestanzahl von Operationen ist, die benötigt werden, um eine bestimmte Genauigkeit zu erreichen, dann läßt sich aus obiger Maßzahl ablesen, wie weit man mit einem gegebenen Algorithmus vom Optimum entfernt ist. Die Mindestanzahl der Operationen, die zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit ε nötig ist, heißt ε -Komplexität. Die ε -Komplexität ist also eine untere Schranke für die Anzahl der Operationen eines Algorithmus, um die Genauigkeit ε zu erreichen.⁷

Die zwei Hauptbestandteile der Computersimulation von Partikelmodellen sind (neben der Konstruktion geeigneter Wechselwirkungspotentiale) die Zeitintegration der Newtonschen Bewegungsgleichungen und das schnelle Auswerten der Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Partikeln.

Zeitintegration: Bei der numerischen Zeitintegration wird die Lösung der betrachteten Differentialgleichung nur zu diskreten Zeitpunkten berechnet. Dazu wird aus den Werten der Approximation zu vorhergehenden Zeitpunkten schrittweise eine Approximation an die Werte zu späteren Zeitpunkten bestimmt. Ist ein konkretes Integrationsverfahren ausgewählt, müssen in jedem Zeitschritt die Kräfte berechnet werden, die auf die einzelnen Partikel wirken. Dies geschieht durch die Bildung des negativen Gradienten der Potentialfunktion des Systems. Bezeichnen wir mit \mathbf{x}_i , \mathbf{v}_i und \mathbf{F}_i jeweils den Ort, die Geschwindigkeit des i -ten Partikels und die Kraft auf das Partikel, so erhalten wir insgesamt den Basis-Algorithmus 1.1 für die Berechnung der Trajektorien von N Partikeln.⁸ Mit vorgegebenen Anfangswerten für \mathbf{x}_i und \mathbf{v}_i mit $i = 1, \dots, N$ wird in einer äußeren Iterationsschleife, beginnend beim Zeitpunkt $t = 0$, die Zeit solange um δt erhöht, bis die Endzeit t_{end} erreicht ist. In einer inneren Iterationsschleife über alle Partikel wird die Kraft auf die einzelnen Partikel sowie deren neue Positionen und Geschwindigkeiten berechnet.

Schnelle Auswertung der Kräfte: In einem System von N Partikeln existieren zunächst N^2 Wechselwirkungen zwischen den Partikeln, von denen wir die Wechselwirkungen der einzelnen Partikel mit sich selbst abziehen müssen. Vernachlässigen wir darüber hinaus noch die doppelt⁹ gezählten Wechselwirkungen, so erhalten wir insgesamt $(N^2 - N)/2$ Operationen zur Auswertung

⁷ Der Zweig der Mathematik und Informatik, der sich mit Fragestellungen in diesem Zusammenhang befaßt, ist die informationsbasierte Komplexitätstheorie, siehe zum Beispiel [606].

⁸ Grundsätzlich lassen sich die in diesem Buch beschriebenen Algorithmen in vielen verschiedenen Programmiersprachen umsetzen. Wir geben im folgenden alle Programme in der Sprache C an, siehe hierzu [40, 350].

⁹ Auf Grund des dritten Newtonschen Gesetzes ist die Wirkung eines Partikels i auf ein Partikel j die gleiche wie die Wirkung des Partikels j auf das Partikel i .

Algorithmus 1.1 Basis-Algorithmus

```

real t = t_start;
für i = 1, ..., N
  setze Anfangsbedingungen  $x_i$  (Orte) und  $v_i$  (Geschwindigkeiten);
while (t < t_end) {
  berechne für  $i = 1, \dots, N$  die neuen Orte  $x_i$  und Geschwindigkeiten  $v_i$ 
  zum Zeitpunkt  $t + \text{delta}_t$  durch ein Integrationsverfahren aus den
  Orten  $x_i$ , Geschwindigkeiten  $v_i$  und Kräften  $F_i$  auf die Partikel zu
  früheren Zeitpunkten;
  t = t + delta_t;
}

```

der Kräfte auf die Partikel. Bei dieser naiven Vorgehensweise müssen also bei N Partikeln in jedem Zeitpunkt $\mathcal{O}(N^2)$ Operationen ausgeführt werden.¹⁰ Das heißt, bei einer Verdoppelung der Anzahl der Partikel vervierfacht sich die Anzahl der Operationen. Aufgrund der beschränkten Leistungsfähigkeit der Rechner ist diese Art der Berechnung der Kräfte nur für relativ kleine Partikelzahlen praktikabel. Beschränkt man sich aber auf eine näherungsweise Berechnung der Kräfte bis auf eine bestimmte Genauigkeit, so läßt sich unter Umständen eine substantielle Reduktion des Rechenaufwandes erreichen.

Die Komplexität einer näherungsweise Kraftberechnung zu einem festen Zeitpunkt ist offenbar mindestens von der Ordnung $\mathcal{O}(N)$, da jedes Partikel mindestens einmal „angefaßt“ werden muß. Algorithmen, deren Aufwand zum Erreichen einer bestimmten Genauigkeit proportional zu N ist, nennt man optimal. Unterscheidet sich der Aufwand des Algorithmus davon nur um einen logarithmischen Faktor, ist er also von der Ordnung $\mathcal{O}(N \log(N)^\alpha)$ mit einem $\alpha > 0$, so nennt man den Algorithmus quasi-optimal. Abbildung 1.5 zeigt einen Vergleich des Aufwands bei Verwendung eines optimalen, eines quasi-optimalen und eines $\mathcal{O}(N^2)$ -Algorithmus. Der $\mathcal{O}(N^2)$ -Algorithmus benötigt zur Berechnung der Interaktionen zwischen 1000 Partikeln in diesem Beispiel etwa soviel Zeit, wie der optimale Algorithmus für die näherungsweise Berechnung der Interaktionen zwischen nahezu einer Million Partikeln benötigt.

Das Ziel ist es, optimale Algorithmen zu finden und diese auch auf dem Computer zu implementieren. Die Vorgehensweise bei der Konstruktion eines geeigneten Algorithmus muß sich dabei zwangsläufig stark an der Art der im Problem vorliegenden Wechselwirkungen und anderen Parametern wie etwa den Dichteschwankungen der Verteilung der Partikel orientieren. Es ist leicht einzusehen, daß Algorithmen, die für eine Form von Wechselwirkungspotentialen optimal sind, für eine andere Form von Potentialen etwa aufgrund mangelnder Genauigkeit der Resultate oder zu hohem Aufwand nicht geeignet sind. Am einfachsten läßt sich dies am Unterschied zwischen einem sehr

¹⁰ Für eine Funktion f bedeutet die Beziehung $f(N) = \mathcal{O}(N^2)$, daß $f(N)/N^2$ für $N \rightarrow \infty$ existiert und beschränkt ist.

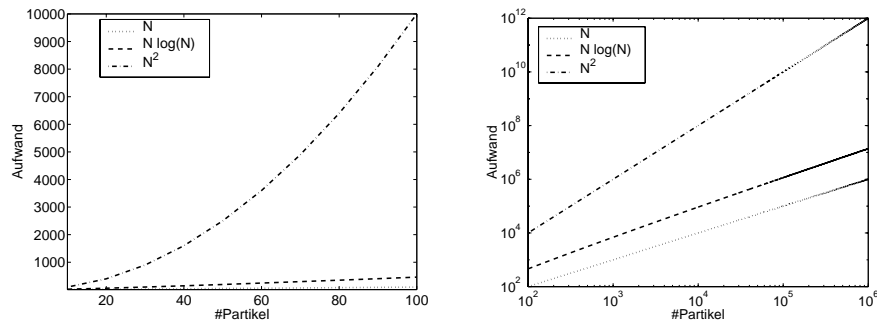


Abb. 1.5. Vergleich des Aufwands bei optimalen, quasi-optimalen und $\mathcal{O}(N^2)$ -Algorithmen (links: lineare Darstellung, rechts: doppelt logarithmische Darstellung).

schnell abfallenden und einem langsam abfallenden Potential veranschaulichen. Dabei verstehen wir unter einem sehr schnell abfallenden Potential, daß ein Partikel nur dann einen signifikanten Beitrag zur Kraft auf ein anderes Partikel ausübt, falls diese nahe genug zusammen sind. Die Auswertung von Kräften durch Gradientenbildung der kurzreichweitigen Potentialfunktion läßt sich im Fall von in etwa gleichverteilten Partikeln in $\mathcal{O}(N)$ Operationen ausführen, da in die Berechnung nur jeweils die Partikel in der näheren Umgebung eingehen müssen. Im Gegensatz dazu können langreichweitige Kräfte, wie Coulomb- oder Gravitationskräfte, die nur sehr langsam abfallen, im allgemeinen nicht einfach ab einem bestimmten Abstand ignoriert werden, siehe [217, 662].

Die in den Abbildungen 1.6 und 1.7 dargestellten Kurven zeigen schematisch ein für langreichweitige Potentiale typisches $1/r$ Verhalten. Für sehr kleine Werte des Abstands r wird das Potential sehr groß und nimmt dann mit größer werdendem Abstand zuerst schnell und dann immer langsamer ab. Eine kleine Änderung der Partikelposition für kleines r wirkt sich sehr stark auf das resultierende Potential aus, vergleiche Abbildung 1.6. Hingegen wirkt sich eine kleine Änderung der Position von Partikeln, die voneinander weiter entfernt sind, nur wenig auf das resultierende Potential aus, vergleiche Abbildung 1.7. Analoges gilt für die resultierenden Kräfte, da die Kraft als der negative Gradient des Potentials definiert ist. Dies bedeutet insbesondere, daß bei der näherungsweisen Auswertung von Potentialen und Kräften für große Werte von r nicht zwischen zwei nahe beieinander liegenden Partikeln unterschieden werden muß, da die resultierenden Werte für beide nahezu gleich sind. Dieses Verhalten wird in Algorithmen für langreichweitige Potentiale ausgenutzt.

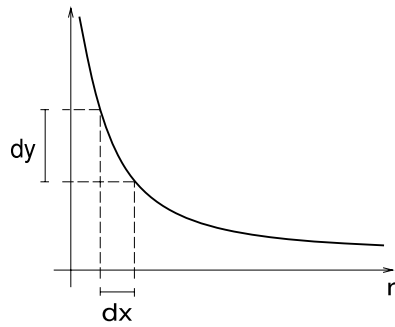


Abb. 1.6. Im Nahfeld (d.h. für kleine Werte von r) resultiert eine kleine Ortsänderung dx der Partikel in einer großen Änderung dy des Potentials.

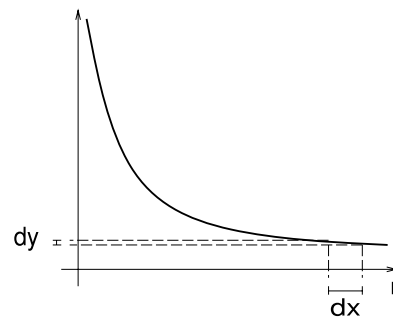


Abb. 1.7. Im Fernfeld (d.h. für große Werte von r) hingegen resultiert eine kleine Ortsänderung dx der Partikel in einer kleinen Änderung dy des Potentials.

Historie. Die Entwicklung der Computersimulation von Partikelmodellen ist eng mit der Entwicklung des Computers verbunden. Der erste Artikel über Moleküldynamik-Simulation stammt von Alder und Wainwright [33] aus dem Jahre 1957. Die Autoren studierten ein Modell mit einigen hundert Partikeln, die untereinander elastische Stöße ausführen und berechneten zugehörige Phasendiagramme. Dabei entdeckten sie die Existenz eines Phasenwechsels von flüssig nach fest.¹¹ Von Gibson, Goland, Milgram und Vineyard [250] wurden kurz darauf durch radioaktive Strahlung auf Mikroebene verursachte Schäden mittels Moleküldynamik-Simulation mit 500 Atomen untersucht. Rahman [490] untersuchte 1964 Eigenschaften flüssigen Argons. Er war der erste, der das Lennard-Jones-Potential in Moleküldynamik-Simulationen verwendete. Verlet führte 1967 in [636] ein Verfahren zur effizienten Verwaltung der Daten in einer Moleküldynamik-Simulation mittels Nachbarschaftslisten ein. Dort wurde auch ein Verfahren¹² zur Zeitintegration vorgestellt, das auch heute noch den Standard in der Moleküldynamik-Simulation darstellt. Erste Untersuchungen für Moleküle wie zum Beispiel Butan wurden 1975 in [525] durchgeführt. Moleküldynamik-Simulationen mit zum Beispiel konstantem Druck oder konstanter Temperatur wurden erstmals zu Beginn der achtziger Jahre in den Arbeiten [42, 323, 446, 447] beschrieben. Auch kompliziertere Potentiale mit Mehrkörperwechselwirkungen hielten schon früh Einzug in die Simulation [57].

¹¹ Zu diesem Zeitpunkt war dies eine große Überraschung, da man annahm, es müßte auch ein anziehendes Potential vorliegen, um einen solchen Phasenübergang zu erzeugen.

¹² Dieses Verfahren baut auf einem von Störmer [579] im Jahr 1907 vorgestellten Ansatz auf, der sich sogar bis ins Jahr 1790 auf Delambre zurückverfolgen läßt [558].

Bei den in diesen frühen Arbeiten verwendeten Potentialen handelte es sich meist um kurzreichweitige Potentiale und die Simulationen waren durch die geringe Leistungsfähigkeit der Rechner noch sehr eingeschränkt. Die Simulation mit langreichweitigen Potentialen, insbesondere für große Partikelzahlen, erforderte weitere Entwicklungsschritte sowohl in der Computertechnologie als auch in den verwendeten Algorithmen. Eine Methode für die Behandlung solcher Potentiale geht in seinen Grundzügen auf Ewald [214] zurück. Bei den daraus resultierenden Verfahren wird das Potential in einen kurzreichweitigen und einen langreichweitigen Anteil zerlegt, die sich einzeln effizient berechnen lassen. Die entscheidende Idee ist dabei die Verwendung schneller Poisson-Löser für den langreichweitigen Anteil. Dabei kommen hierarchische Methoden, insbesondere die schnelle Fouriertransformation und Multilevelverfahren zum Einsatz. Die verschiedenen Varianten dieser sogenannten P^3M -Methode [200, 320] unterscheiden sich in der Wahl einzelner Komponenten des Verfahrens (Interpolationsmethoden, Auswertung der Kräfte aus dem Potential, Adaptivität, schnelle Löser u.a.). Ein prominentes Beispiel ist die sogenannte Particle-Mesh-Ewald-Methode (PME) [167, 213, 370], die B-Spline- oder Lagrange-Interpolation zusammen mit schneller Fouriertransformation verwendet. Siehe [209, 480, 565] und [603] auch für einen Überblick über existierende P^3M -Varianten.

Eine andere Klasse von Methoden für langreichweitige Potentiale nutzt eine Entwicklung (Taylor-Reihe, Multipol-Entwicklung) der Potentialfunktionen nach dem Abstand zwischen den Partikeln für die approximative Auswertung von Partikelinteraktionen. Die resultierenden Daten werden zu ihrer effizienten Verwaltung in Baumstrukturen gespeichert. Einfache Vertreter dieser Klasse, die häufig in der Astrophysik Verwendung finden, stammen von Barnes und Hut [58] und Appel [47]. Neuere Varianten von Greengard und Rohklin [257, 260, 517] verwenden höhere Momente in den Entwicklungen.

In den letzten Jahren fand die Parallelisierung von Algorithmen für die Moleküldynamik-Simulation ebenfalls große Beachtung. Die Beschreibung paralleler Algorithmen für kurzreichweitige Potentiale findet sich zum Beispiel in [71, 475] und [495]. Parallele Varianten des P^3M -Verfahrens finden sich in [597, 604, 669] beziehungsweise [219]. Parallele Versionen der Barnes-Hut- beziehungsweise Multipol-Methode wurden zum Beispiel in [258, 642, 643, 645, 676] vorgestellt. Sowohl hier, als auch bei der Parallelisierung von Algorithmen für kurzreichweitige Potentiale kommen Gebietszerlegungsverfahren zum Einsatz.

Die Darstellung des theoretischen Hintergrunds sowie die detaillierte Beschreibung unterschiedlicher Methoden und Anwendungsbereiche der Moleküldynamik finden sich in einer Reihe von Büchern und Sammelbänden [34, 90, 146, 147, 237, 279, 320, 324, 369, 598]. Inzwischen sind die meisten Methoden in einer Fülle kommerzieller und forschungsorientierter Programmpakete implementiert. Beispiele sind AL_CMD [619], Amber [464], CHARMM [125, 126, 396], DL-POLY [562], EGO [203], GROMACS [83], GROMOS

[625], IMD [522], LAMMPS [474], Moldy [499], MOSCITO [456], NAMD [440], OPLS [344], ORAC [2, 483], PMD [653], SIGMA [310], SPaSM [69] und YASP [435]. Pbody [93] und DPMTA [95] bieten parallele Bibliotheken für N -Körper Probleme. NEMO [595], GADGET [3] und HYDRA [4] sind insbesondere für astrophysikalische Anwendungen geeignet.

Dieses Buch schlägt die Brücke von der Theorie der Moleküldynamik zur Implementierung von leistungsfähigen parallelen Algorithmen und deren Anwendungen. Hauptziel ist es dabei, die notwendigen numerischen Techniken der Moleküldynamik in kompakter Form einzuführen, die einzelnen Schritte bei der Entwicklung leistungsfähiger Algorithmen darzustellen und die Implementierung dieser Algorithmen auf sequentiellen und auch auf parallelen Rechensystemen zu beschreiben. Durch die ausführliche Herleitung und explizite Angabe der Programmcodes sowie der in den Beispielanwendungen benötigten Programmparameter soll der Leser in die Lage versetzt werden, selbst ein Moleküldynamik-Simulationsprogramm zu implementieren, dieses auf parallelen Rechensystemen einzusetzen und Simulationen eigenständig durchzuführen.

Dieses Buch wendet sich dabei hauptsächlich an zwei Leserkreise. Einerseits an Studierende, Lehrende und Forscher der Fachrichtungen Physik, Chemie und Biologie, die sich ein vertieftes Verständnis der Grundlagen und der Leistungsfähigkeit von Moleküldynamik-Software und deren Anwendungsmöglichkeiten erarbeiten wollen. Andererseits wendet es sich an Mathematiker und Informatiker, denen es die Möglichkeit bietet, eine Reihe verschiedenartiger numerischer Verfahren anhand eines konkreten Anwendungsgebiets kennenzulernen.

Entsprechend der Vorbildung und dem Interesse des Lesers empfiehlt sich insbesondere bei der erstmaligen Lektüre dieses Buches eine selektive Auswahl einzelner Kapitel. Einen geeigneten Einstieg bieten die Kapitel 3 und 4, wobei die Abschnitte 3.7.4 und 3.7.5 beim ersten Lesen übersprungen werden können. Auch die Kapitel 2, 5 und 6 können zunächst überlesen werden. Zudem sind die Kapitel 7, 8 und 9, bis auf einige Grundkenntnisse aus den Kapiteln 3 und 4, als eigenständige Abschnitte konzipiert.