

TEKST NR 227

1992

***Computersimulering
og fysik***

Af:

Per M. Hansen

Steffen Holm

Peter Maibom

Mads K. Dall Petersen

Pernille Postgaard

Thomas B. Schrøder

Ivar P. Zeck

Vejleder:

Peder Voetmann Christiansen

TEKSTER fra

IMFUFA

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postboks 260,
4000 Roskilde

Computersimulering og fysik

af: Per M. Hansen, Steffen Holm, Peter Maibom, Mads K. Dall
Petersen, Pernille Postgaard, Thomas B. Schrøder, Ivar P. Zeck

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen

IMFUFA tekst nr. 227/92

131 sider

ISSN 0106-6242

Abstract:

Baggrunden for denne tekst har været en fornemmelse af, at den stadig større brug af computere indenfor fysik har haft stor indflydelse på fysikforskningen. Teksten fokuserer specielt på anvendelsen af computersimulering i fysik. Følgende spørgsmål forsøges besvaret:

- På hvilken måde arbejder fysikere med simulering?
- Hvordan placerer simulering sig i forhold til teori og eksperiment?
- Hvordan har simulering påvirket udviklingen af fysikkens genstandsområder?

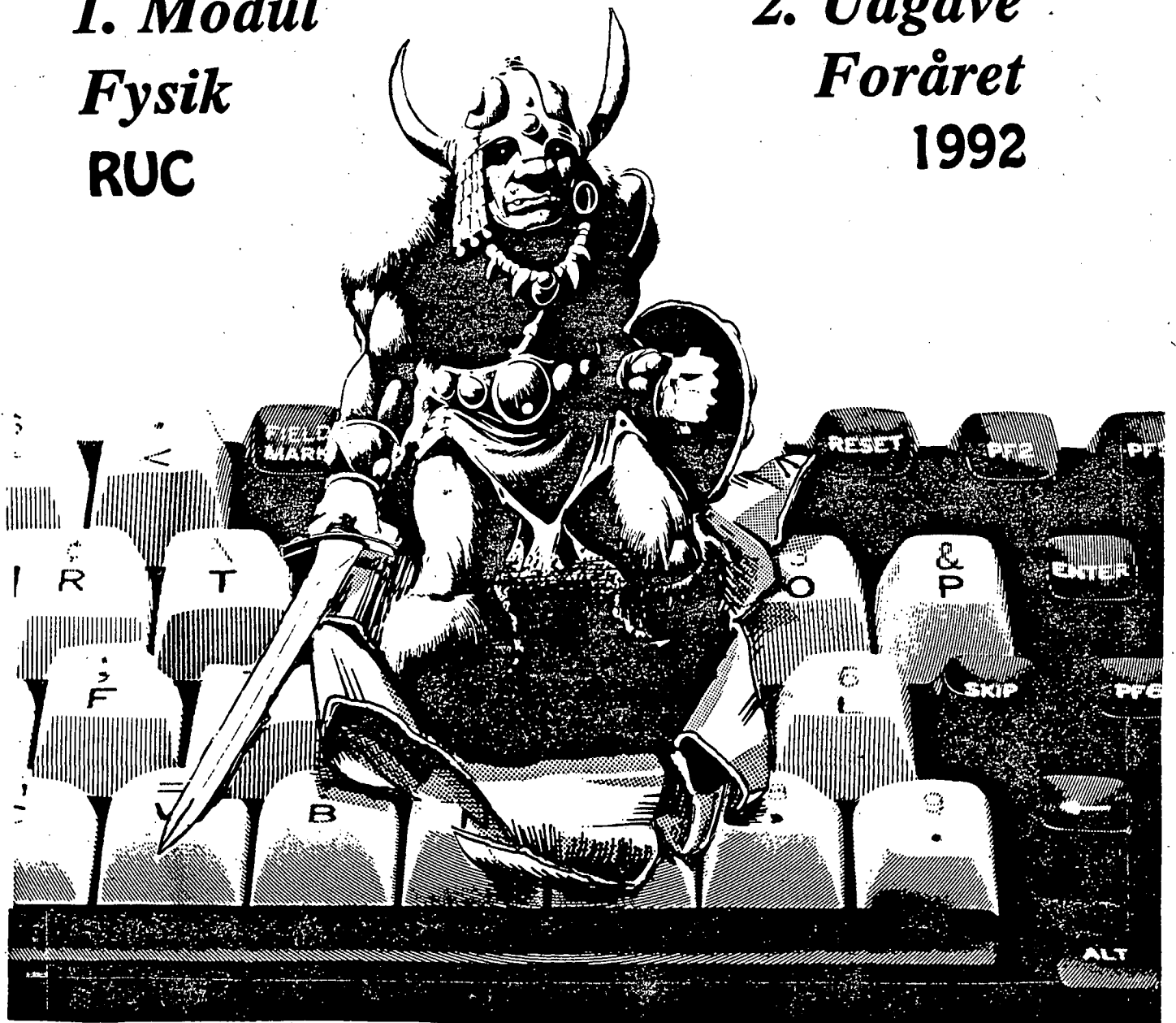
Teksten er bygget omkring tre hovedafsnit. Det første omhandler computersimuleringens historie. Det andet beskæftiger sig med en række interviews af fysikere, der bruger computeren som redskab i deres forskning. Det tredje beskriver en computersimulering, vi selv har lavet, samt hvordan denne har udviklet sig.

Disse tre hovedafsnit skal hver især give forskellige indfaldsvinkler til computersimuleringens anvendelse i fysiken. I historiekapitlet skildres de vilkår, under hvilke fysikerne har arbejdet med computeren op igennem tiden, og hvilke resultater det har givet. Interviewafsnittet beskæftiger sig med de interviewede fysikers personlige erfaringer med simulering. Specielt behandles deres opfattelse af egne arbejdsmetoder og overordnede formål med de simuleringer, som de foretager. Endelig har vi også selv prøvet at udføre computersimuleringer for herigennem at få et førstehåndskendskab til dét at arbejde med simuleringer samt bedre at kunne vurdere samspillet mellem computersimulering og teori/eksperiment.

C mputersimulering g fysik.

1. Modul
Fysik
RUC

2. Udgave
Foråret
1992



Abstract:

Baggrunden for denne tekst har været en fornemmelse af, at den stadigt større brug af computere indenfor fysik har haft stor indflydelse på fysikforskningen. Teksten fokuserer specielt på anvendelsen af computersimulering i fysik. Følgende spørgsmål forsøges besvaret:

- På hvilken måde arbejder fysikere med simulering?
- Hvordan placerer simulering sig i forhold til teori og eksperiment?
- Hvordan har simulering påvirket udviklingen af fysikkens genstandsområder?

Teksten er bygget omkring tre hovedafsnit. Det første omhandler computersimuleringens historie. Det andet beskæftiger sig med en række interviews af fysikere, der bruger computeren som redskab i deres forskning. Det tredje beskriver en computersimulering, vi selv har lavet, samt hvordan denne har udviklet sig.

Disse tre hovedafsnit skal hver især give forskellige indfaldsvinkler til computersimuleringens anvendelse i fysiken. I historiekapitlet skildres de vilkår, under hvilke fysikerne har arbejdet med computeren op igennem tiden, og hvilke resultater det har givet. Interviewafsnittet beskæftiger sig med de interviewede fysikers personlige erfaringer med simulering. Specielt behandles deres opfattelse af egne arbejdsmetoder og overordnede formål med de simuleringer, som de foretager. Endelig har vi også selv prøvet at udføre computersimuleringer for herigennem at få et første-håndskendskab til dét at arbejde med simuleringer samt bedre at kunne vurdere samspillet mellem computersimulering og teori/eksperiment.

Indledning.	8
Formål.	8
Problemformuleringer.	9
Læsevejledning.	9
 Kapitel 1	 11
Computersimuleringer	11
Definition af simulering	11
Inddeling af simuleringer.	11
Deterministisk simulering.	12
Stokastisk simulering.	12
Kontinuert/diskret simulering.	12
Tid.	13
Uddybende eksempler.	13
Kildefortegnelse.	17
 Kapitel 2	 18
Computersimuleringens historie	18
Hardware historie.	18
Molecular Dynamics-metodens historie.	23
Monte Carlo-metodens historie.	26
Opsummering.	29
Hardwareudviklingen.	29
Softwareudviklingen.	29
Simulering giver mulighed for at studere komplekse systemer.	30
Simulering af store systemer.	30
Perspektivering.	30
Kildefortegnelse	33
 Kapitel 3	 35
Interview og undersøgelser	35
Interviews.	35
Kort om hver enkelt af de interviewede.	36
Selve interviewet.	37
Spørgsmål til interview.	37
Sammenfatning af interviews.	38
Arbejdsmetoder.	38
Formål med simuleringer.	39
Forringet forskningskvalitet som følge af computeren.	40
Historisk udvikling.	41
Indvirkning på fysikkens genstandsområder.	41
Fremtiden.	42
Hvorfor store computere?	42
Spørgeskema undersøgelser.	42

Undersøgelse fra '65.	43
Undersøgelser fra '91	44
Opsummering.	45
Interviews.	45
Undersøgelser.	46
Sammenligning af undersøgelser og interview.	47
Kildefortegnelse	47
 Kapitel 4	 48
Egne simuleringer	48
Eksperimentelle resultater.	49
Teoretisk arbejde.	50
Modellen	50
Beregningen af ledningsevnen ud fra modellen.	52
Ledningsevns frekvensafhængighed.	53
Forventet løsning.	54
Algoritmer.	54
"Brute Force" algoritmen.	54
Ventetids algoritmen.	55
Ventetids algoritmen i 3 dimensioner.	57
Overordnet forløb.	58
Fase 1: Forståelsesfasen.	58
Fase 2: Programmeringsfasen.	58
Fase 3: Resultatsfasen.	59
Videre arbejde med simuleringen.	62
 Erfaringer med simulering.	 63
Fysikernes arbejdsmetode.	64
 Kildefortegnelse.	 65
 Kapitel 5	 66
Diskussion	66
Fordele og ulemper ved simulering	66
En overvejelse om valget af integrationsmetode, og begrebet ergodisitet.	67
Arbejdsmetoder.	69
Sammenspillet mellem det mikroskopiske og makroskopiske niveau i simuleringer	71
Simuleringens indvirkning på genstandsområderne i fysikken.	72
Perspektivering	73
Konklusion	74
Kildefortegnelse	74
 Appendix A	 75
 Interviews	 75

Referat af interview med Tage Christensen	75
Referat af interview med Eigil Præstgaard	77
Referat af interview med Jeppe Dyre	79
Referat af interview med Niels Boye Olsen	82
Referat af interview med Tomas Bohr og Mogens Høgh Jensen	84
Referat af interview med Benny Lautrup	88
Referat af interview med Ole Holm Nielsen	90
Referat af interview med Åke Nordlund	93
Referat af interview med Søren Toxværd	95
Appendix B	97
QUESTIONAIRE	97
Appendix C	99
Ising-modellen samt Monte Carlo	99
Ising-modellen	99
Opstilling af Ising-modellen.	99
Hvad er Monte Carlo-metoden ?	100
Hvad er et ensemble ?	100
Monte Carlo simulering af Ising-modellen.	101
Metropolis-algoritmen.	101
Kommentarer til programmet.	103
Resultater	104
Appendix D	113
Teorien bag hopmodellen	113
FD-teoremet	113
Udledning af FD-teoremet.	114
Sammenhængen mellem den makroskopiske og den mikroskopiske be- skrivelse af vores system	116
Udledning af Kuboformlen	119
Udledning af Kuboformlen for den frekvensafhængige lednings- evne	119
Kildefortegnelse	121
Appendix E	122
Programudskrifter	122
Program til simulering af den 1-dimensionale model (led_vt.sim)	122
Program til simulering af den 3-dimensionale model	126

Forord.

Denne rapport er et resultat af ét semesters projektarbejde på fysikoverbygningen. Projektet er et modul 1 projekt, hvilket efter den nyeste terminologi kaldes et metaprojekt. Kravet til et metaprojekt er, at det skal inddrage filosofiske, historiske eller samfundsmæssige betragtninger. Det er naturligt at skrive et metaprojekt som det første projekt på fysikuddannelsen, da det giver et overblik over faget og derved et godt grundlag for de følgende års studium. Det er derfor det første projekt på overbygningen for alle 7 medlemmer af gruppen.

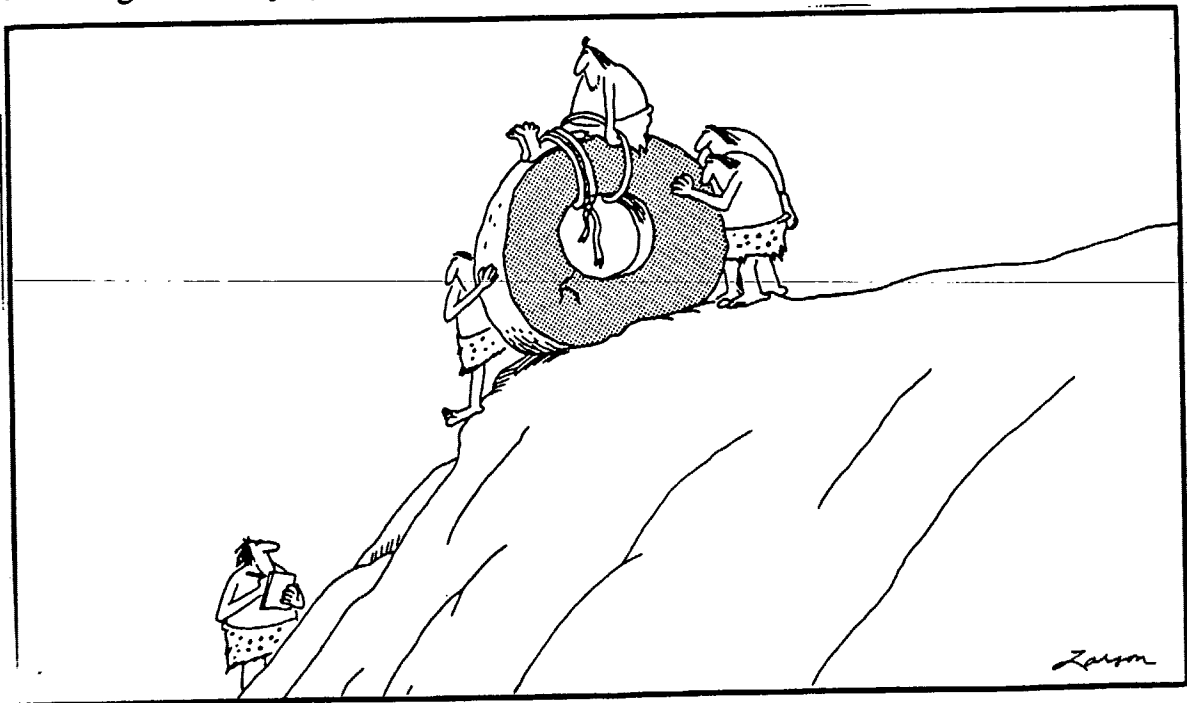
Vi takker Tomas Bohr, Tage Christensen, Jeppe Dyré, Mogens Høgh Jensen, Benny Lautrup, Ole Holm Nielsen, Åke Nordlund, Niels Boye Olsen, Eigil Præstgaard og Søren Toxværd, der har afsat tid til vores interviews og dermed været en af de vigtigste kilder til vores viden.

Endvidere tak til vores vejleder Peder Voetmann Christiansen for mange spændende diskussioner.

Gruppen består af:

Per M. Hansen.
Steffen Holm.
Peter Meibom.
Mads K. Dall Petersen.
Pernille Postgaard.
Thomas B. Schrøder.
Ivar P. Zeck.

Forsideillustrationen er taget fra "Dragon Magazine" nr. 177, 1992.
Forskellige steder i projektet vil der være udpluk fra Gary Larsons "Far out" - tegneserier.



Early experiments in transportation

Indledning.

Computersimulering har fået en vid udbredelse indenfor mange felter, både indenfor de fleste grene af videnskaben, men også i erhvervslivet. Man kan f.eks. simulere epidemimodeller, klimamodeller og modeller af trafikken. Man kan sågar argumentere for, at det er en simulering, når man sætter sig ved sin PC for at få et slag skak.

Vores velbegrundede fornemmelse, da vi dannede gruppen, var, at simulering er meget nyttigt inden for fysikken, og at dét at simulere har fundet stor anvendelse. Formålet med vores projektarbejde har været at studere, hvordan simulering bliver anvendt af fysikere, og hvilken indflydelse simulering har haft på udviklingen af fysikken.

Det viste sig, at information relevant for et metaprojekt om disse emner ikke var let tilgængelig. Den sædvanlige litteratur om simulering er centreret om algoritmer og andre emner relateret til den praktiske udførelse af simulering. Medens en diskussion af simuleringens rolle og vigtighed i fysikken eller en beskrivelse af simuleringens historie er mere sjælden. Specielt er litteraturen mangelfuld, hvis man som os er interesseret i, hvordan arbejdsgangen for en simulerende fysiker er. Derfor blev vi nødsaget til at indsamle informationerne på anden vis.

Vi undersøgte tidsskriftet "Physics Today" fra 40'erne til idag. Formålet var at finde statistisk materiale for en udtalelse om, hvor meget simulering blev anvendt i fysikken. Det viste sig, at der op igennem tiden var skrevet meget få artikler, der gav udtryk for, at der var benyttet simulering. Vi fandt dog nogle artikler af interesse, selvom der ikke var nok til en statistisk undersøgelse.

Vi valgte derfor at søge informationerne hos fysikere, der selv benytter simulering – de må jo vide, hvad de går rundt og laver. En vigtig ingrediens i vores projekt er derfor blevet interviewene med fysikere, som bruger simulering.

Vi har dog også angrebet emnet fra to andre vinkler for at få en bredere og mere fyldestgørende behandling af dette. Den ene indfaldsvinkel har været en historisk gennemgang af anvendelsen af simulering indenfor statistisk mekanik. Vi valgte statistisk mekanik, fordi det er et område, der meget tidligt tog simulering i brug. Hensigten var at drage konklusioner om simuleringens nytte og anvendelse op igennem tiden. Den anden indgangsvinkel var selv at udføre simuleringer. Disse har dannet baggrund for erkendelsesmæssige betragtninger om arbejdsgangen i simuleringer. Begge indfaldsvinkler bidrog endvidere til en faglig baggrund, som har været til nytte under interviewene.

Formål.

Igennem interviews og egne computersimuleringer vil vi undersøge fysikernes arbejdsmetoder med hensyn til, hvordan de benytter simulering i deres forskning. Vi havde fra starten en idé om, at man kan arbejde med computersimuleringer på forskellige måder. En af måderne er at bruge computeren som et redskab til at bekræfte sine teorier og modeller med. Således at man allerede før simuleringen har en klar idé om, hvilket resultat den vil give. Simuleringen kan

også bruges som et idéudviklende redskab. Dvs. i et kreativt samspil mellem fysiker og computer hvor ideer kan forfølges under simuleringen og føre til nye erkendelser.

Det er endvidere vores formål at undersøge hvor computersimulering placerer sig i forhold til teoretisk og eksperimentel fysik. Dette skal ses som en måde at vurdere simuleringens videnskabelige status på; er simulering en del af den teoretiske fysik, er det en del af den eksperimentelle fysik, eller er det en helt ny gren inden for fysikken?

Desuden vil vi belyse, hvorledes den videnskabelige brug af computeren har påvirket udviklingen i fysikken på et mere overordnet plan. Specielt vil vi undersøge, om der er sket ændringer indenfor de enkelte fagområder, og om der eventuelt er opstået nogle helt nye.

Herved er følgende problemformuleringer fremkommet:

Problemformuleringer.

- På hvilken måde arbejder fysikere med simulering?
- Hvordan placerer simulering sig i forhold til teori og eksperiment?
- Hvordan har simulering påvirket udviklingen af fysikkens genstandsområder?

Projektet er bygget omkring tre hovedafsnit. Det første omhandler computersimuleringens historie. Det andet beskæftiger sig med en række interviews af fysikere, der bruger computeren som redskab i deres forskning. Det tredje beskriver en computersimulering, vi selv har lavet, samt hvordan denne har udviklet sig.

Disse tre hovedafsnit skal hver især give forskellige indfaldsvinkler til computersimuleringens anvendelse i fysiken. I historiekapitlet skildres de vilkår, under hvilke fysikerne har arbejdet med computeren op igennem tiden, og hvilke resultater det har givet. Interviewafsnittet beskæftiger sig med de interviewede fysikers personlige erfaringer med simulering. Specielt behandles deres opfattelse af egne arbejdsmetoder og overordnede formål med de simuleringer, som de foretager. Endelig har vi også selv prøvet at udføre computersimuleringer for herigennem at få et førstehåndskendskab til dét at arbejde med simuleringer samt bedre at kunne vurdere samspillet mellem computersimulering og teori/eksperiment.

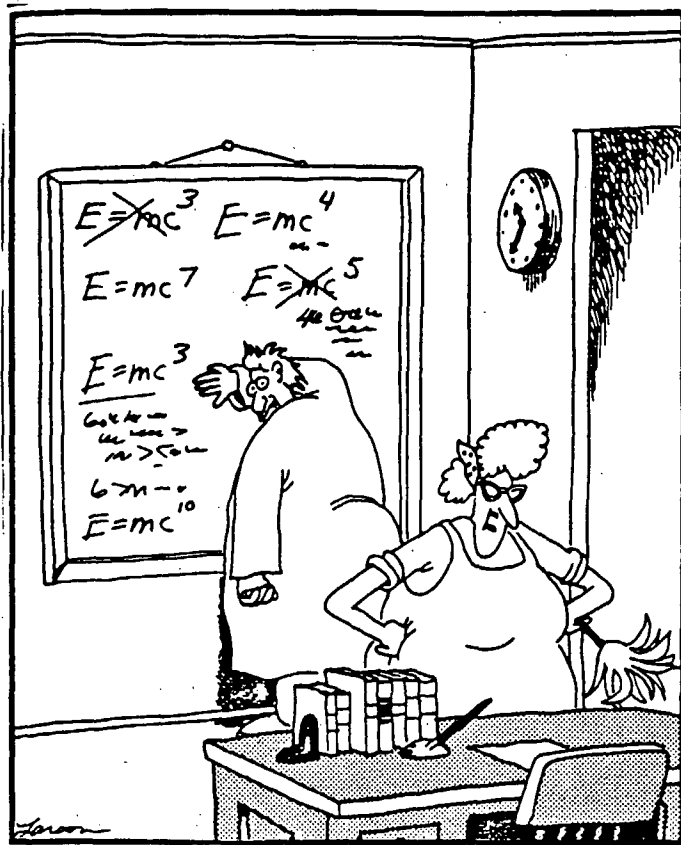
Læsevejledning.

Vi starter i kapitel 1 med at definere, hvad vi mener med en simulering for at have fast grund under fødderne i den videre diskussion af emnet.

Her efter kommer de 3 hovedafsnit, kapitel 2, 3 og 4, som belyser vores problemformulering fra 3 forskellige synsvinkler.

Kapitel 5 er en diskussion af de pointer, som vi er kommet frem til på baggrund af vores undersøgelser i de 3 foregående kapitler, samt en perspektivering hvor vi prøver at forudsige, hvad fremtiden vil bringe inden for simulering i fysikken.

Appendix A indeholder referater af de interviews vi har foretaget og vi opfordrer på det kraftigste til at de læses. Appendix B er et spørgeskema til en af de undersøgelser, som vi har benyttet i kapitel 3. Appendix C er en gennemgang af en simulering af Ising-modellen, som vi selv har foretaget. I appendix D udleder vi nogle de vigtigste matematiske sætninger i vores simulering af frekvensafhængig ledningsevne i uordnede stoffer. Appendix E er udskrifter af de programmer, vi har brugt til at simulere den frekvensafhængige ledningsevne i uordnede stoffer.



"Now that desk looks better. Everything's squared away, yessir, squaaaaared away."

Kapitel 1.

Computersimuleringer.

Definition af simulering.

I litteraturen finder man mange forskellige definitioner på, hvad simulering er [1, 2 & 3]. Derfor er det nødvendigt, at vi definerer, hvad vi mener, når vi bruger dette ord.

Vi har valgt en bred definition for ikke at udelukke nogle simuleringemetoder. Derved er vi kommet frem til følgende:

"En simulering er en numerisk løsning af en dynamisk model med givne begyndelsesbetingelser".

Det skal være en numerisk løsning, da det i nogle tilfælde kan lade sig gøre at anvende et regneprogram til at løse en model analytisk, hvilket vi ikke opfatter som en simulering.

Desuden er det vigtigt at understrege, at der er tale om en *dynamisk* model, da vi ikke mener at alt, hvad der løses numerisk, er simuleringer. Med dynamisk menes en model, som ændrer sig i tid.

Endelig opfatter vi simulering som en metode til at opnå *én* løsning ud af en mangfoldig løsningsmængde, hvilket forklarer kravet om givne begyndelsesbetingelser. Dette pointeres, fordi vi forstår en simulering som en stikprøve – i modsætning til en fuldstændig numerisk løsning af en model (dvs. en løsning for alle begyndelsesbetingelser).

Man er ikke begrænset til at simulere fænomener, som kan optræde i naturen, idet det kan være interessant at ændre lidt på naturens spilleregler og iagttage resultatet. F.eks. kan det give en øget forståelse af Newtons gravitationslov at ændre potensen af r (afstanden mellem legemerne), og se hvilken indflydelse det har på en satellits banekurve omkring en planet.

Inddeling af simuleringer.

Da vores definition er bred, vil vi, for at give en forståelse og en uddybning af hvad der menes med simulering, inddele simuleringerne i forskellige kategorier. I litteraturen finder man ofte en skelnen mellem deterministiske og stokastiske simuleringer og ind imellem en skelnen mellem kontinuert eller diskret simulering [1, 2 & 3]. Den nedenstående beskrivelse af de forskellige kategorier er et resultat af, hvad vi har fundet i litteraturen samt diskussion i gruppen af holdbarheden af disse inddelinger; bla. med baggrund i egne simuleringer. Kategorierne kan kombineres – f.eks. findes der simuleringer, som indeholder både deterministiske og stokastiske træk. Sidst i kapitlet gennemgår vi 4 eksempler til illustration af de opstillede inddelinger.

Deterministisk simulering.

En deterministisk simulering er defineret ved, at to simuleringer med samme begyndelsesbetingelser altid giver samme dynamiske forløb og derved også samme slutresultat. Det vil sige at de love, der bestemmer dynamikken i det simulerede system, er deterministiske. Et eksempel kunne være simulering af det skrå kast. Da den bagvedliggende dynamik er givet ved tyngdeloven samt evt. et udtryk for luftmodstanden, vil begyndelsesbetingelserne (kastevinkel og impuls) bestemme banekurvens udseende entydigt.

Stokastisk simulering.

En stokastisk simuleringsmetode er karakteriseret ved, at den benytter ideer og teorier udviklet indenfor sandsynlighedsregningen og den statistiske mekanik. I en stokastisk model vil en eller flere af de love, som bestemmer systemets udvikling, være repræsenteret ved nogle størrelser i systemet, som vælges efter bestemte sandsynlighedsfordelinger vha. tilfældige tal. Fordelen ved dette er bla., at man dermed reducerer systemets frihedsgrader, idet den underliggende dynamik, som kan være meget kompliceret, kommer til udtryk i en stokastisk fordelt størrelse.

En interessant egenskab ved den stokastiske simuleringsmetode er, at den ikke begrænser sig til simulering af stokastiske systemer, men også kan simulere deterministiske. Stokastiske simuleringer anvendes ofte til at simulere systemer, der er i ligevægt. Dette skyldes, at en stokastisk simuleringsmetode bygger på kendskab til den fordeling systemet skal opnå, hvilket ofte er velkendt for systemer i ligevægt (f.eks. er det systemer i ligevægt, som den statistiske mekanik drejer sig om).

Kontinuert/diskret simulering.

Normalt er et kontinuum beskrevet ved reelle tal. I en computer kan man principielt ikke repræsentere reelle tal, da computeren regner med et endeligt antal cifre. Derfor giver det problemer at beskrive et kontinuum i en computer, eftersom alle beregninger i princippet bliver diskretiserede. Dette skaber vanskeligheder med at skelne mellem diskrete og kontinuerte simuleringer. For alligevel at kunne skelne bliver man nødt til at inddrage den bagvedliggende model.

I de følgende beskrivelser af kontinuerte og diskrete simuleringer vil vi behandle rum og tid hver for sig.

Rum.

Om rummet i en simulering er kontinuert eller ej, afhænger af om man inddeler rummet i et gitter, hvorpå partiklerne (eller hvad der ellers simuleres) kun har mulighed for at bevæge sig fra ét gitterpunkt til et andet. Hvis dette gøres, kan stedkoordinaterne kun antage bestemte værdier, hvorfor rummet i simuleringen er diskret.

En simulering med kontinuert rum kræver derimod, at stedkoordinaterne kan antage alle mulige værdier. I praksis vil man i en simulering repræsentere rummet med "pseudo-reelle"

tal, dvs. decimaltal med et endeligt antal cifre. Dette betyder, at rummet i matematisk forstand ikke er kontinuert, men da dette ikke i praksis kommer til udtryk i resultaterne, betragter man normalt alligevel rummet som værende kontinuert.

Tid.

Analogt med definitionen af kontinuert rum betragtes tiden i simuleringen som værende kontinuert, hvis tiden kan antage alle mulige værdier.

Ovenstående definition betragter tiden som et resultat af simuleringen – på samme måde som stedkoordinaterne er det. Ofte er det tiden, der er den uafhængige variabel, dvs. at den er den styrende parameter i simuleringen (ligesom vi forestiller os, at det er i virkeligheden).

For at gøre tiden kontinuert i en sådan simulering skal man i princippet dele tiden op i uendeligt små tidsskridt. For at simuleringen ikke skal tage uendelig lang tid, må man i praksis anvende tidsskridt af en endelig størrelse. Det, der medfører, at tiden alligevel kan opfattes som værende kontinuert, er at der i simuleringen tages hensyn til, at der sker en udvikling i systemet, mens der "foregår" et tidsskridt. Dette betyder så, at man skal sørge for, at disse endelige tidsskridt er tilstrækkeligt små, således at de ikke får signifikant betydning for resultaterne. Dette gøres ofte ved at anvende variable tidsskridt, så algoritmen automatisk justerer tidsskridtene sådan, at den ønskede nøjagtighed opnås. Man kan også i nogle tilfælde anvende faste tidsskridt, hvis man kan regne sig frem til, eller erfaringsmæssigt er sikker på, at disse giver den ønskede nøjagtighed.

Med ovenstående definition af kontinuert tid bliver definitionen af diskret tid, at tiden udvikler sig skridtvis, og at der ikke sker nogen udvikling i det simulerede system mellem tidsskridtene.

Uddybende eksempler.

For at illustrere ovenstående inddelinger beskriver vi i det følgende 4 væsensforskellige simuleringer.

3-legeme problemet.

I dette problem vil man beskrive opførslen af 3 legemer, der påvirker hinanden med gravitationskræfter. Dette er ikke et trivielt problem, idet man (modsat 2-legeme problemet) ikke kan løse det analytisk.

3-legeme problemet simuleres, som man forventer, at det foregår i virkeligheden. Man opskriver derfor bevægelsesligningerne efter den klassiske mekaniks forskrifter, i hvilke tid og rum er kontinuerte størrelser. At simuleringen er kontinuert, betyder i dette tilfælde, at tidsskridtene er så små, at sted- og hastigheds- koordinaterne bestemmes med den ønskede nøjagtighed.

Simuleringen af 3-legeme problemet benytter sig af den klassiske mekanik, og i overensstemmelse hermed er det en deterministisk simulering.

Metoden med at opskrive bevægelsesligningerne er meget anvendt, da det virker umiddelbart rigtigt at implementere de kendte bevægelseslove direkte i ens simulering. Indenfor statistisk mekanik kaldes metoden for Molecular Dynamics. Som navnet måske antyder, tager denne metode sit udgangspunkt på det mikroskopiske niveau. Ved at lade bevægelsesligningerne virke på en samling partikler/molekyler vil man forsøge at beskrive makroskopiske størrelser. Vi vil senere i projektet høre mere til Molecular Dynamics.

Ising-modellen.

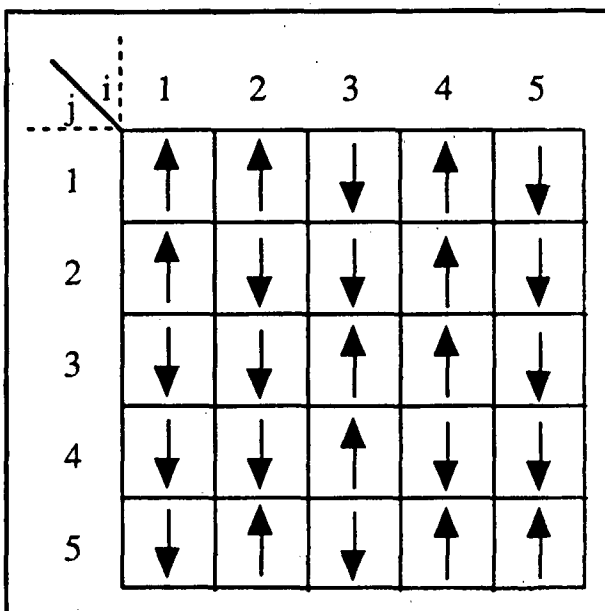
Simuleringen af Ising-modellen er et klassisk eksempel på en Monte Carlo-simulering – en metode, der hører til en af de mest benyttede stokastiske simuleringmetoder.

Ising-modellen kan modellere en ferromagnet i termisk ligevægt, idet man tænker sig at ferromagneten består af små magneter (spin), der helst vil have samme orientering. Modellen er en gittermodel, hvor der på hver gitterplads er et spin (s_{ij}), som enten kan antage værdien "op" ($=+1$) eller "ned" ($=-1$), svarende til de små magneters orientering (se fig. 1.1). Det er muligt at flippe spinnene, således at orienteringen vender. Tiden i simuleringen tælles i flipforsøg, idet man tænker sig, at et enkelt spin vil forsøge at flippe med jævne mellemrum. Ind imellem dette forestiller man sig at der intet sker, hvorfor den bagvedliggende dynamik er diskret. Simuleringen er altså tidslig og rumlig diskret.

Energien af et enkelt spin er givet ved følgende udtryk:

$$e = -J * s_{ij} (s_{i-1j} + s_{i+1j} + s_{ij-1} + s_{ij+1})$$

J er positiv, hvilket betyder, at det enkelte spin helst vil have, at de tilhørende 4 nabospin vender den samme vej som det selv, da dette giver den laveste energi. Systemets samlede energi, E , er givet ved summen af energiværdierne på alle gitterpladserne. Problemet med at bestemme nabospin til de spin, der befinder sig på kanten af gitteret, løses ved at anvende såkaldte "periodiske randbetingelser". Dette vil sige, at man anvender spinnene på højre kant som nabospin til dem på venstre kant (og omvendt). Når man så behandler den nederste og den øverste kant på samme måde, har alle spin fået det rigtige antal nabospin.



Figur 1.1. Den 2-dimensionelle Ising-model.

I den statistiske mekanik er en grundlæggende lovmæssighed Boltzmann-fordelingen. Denne udtrykker, hvordan mikrotilstandene af et system i termisk ligevægt vil fordele sig, som funktion af den energi systemet har i de enkelte mikrotilstande. Boltzmann-fordelingen gælder for et system, hvor temperaturen, T , holdes konstant, hvilket kan gøres ved at magneten placeres i et varmebad. Ideen i simuleringen er at generere mikrotilstande vha. tilfældige tal, således at fordelingen af mikrotilstandene svarer til Boltzmann-fordelingen. Som det er vist

i appendix C, opnås dette, hvis man anvender Metropolis-algoritmen:

- 1) Vælg en tilfældig startkonfiguration.
- 2) Udvælg et tilfældigt spin til flipforsøg.
- 3) Accepter flipforsøget, hvis det resulterer i at energien i systemet falder.
- 4) Hvis energien stiger, så accepter flipforsøget med sandsynligheden $e^{-\Delta E/kT}$, hvor ΔE er energiændringen og k er Boltzmanns konstant.
- 5) Gå til punkt 2.

Når man simulerer Ising-modellen på denne måde (som beskrevet i appendix C) vil man se, at den udviser en faseovergang – ligesom i virkeligheden er stoffet kun magnetisk udadtil, hvis temperaturen er mindre end en bestemt kritisk værdi.

Cellulære automater.

I denne type simulering definerer man et gitter, hvor hvert gitterpunkt kan antage værdier efter nogle forudbestemte regler. Man opdaterer ved hvert tidsskridt de nye værdier, som de forskellige gitterpladser antager efter disse regler.

Cellulære automater er en simuleringsmetode, der kan anvendes til mange forskellige modeller. Man kan simulere mange systemer, bla. turbulens i væsker, men specielt kendt er den model, der populært kaldes "The Game of Life".

Man forestiller sig et 2-dimensionalt gitter, hvor hvert gitterpunkt har 8 naboer. Der anvendes, ligesom i Ising-modellen, periodiske randbetingelser. I hvert gitterpunkt sidder en bakterie, som enten kan være "død" eller "levende". Dynamikken i systemet er nu beskrevet ved følgende regler:

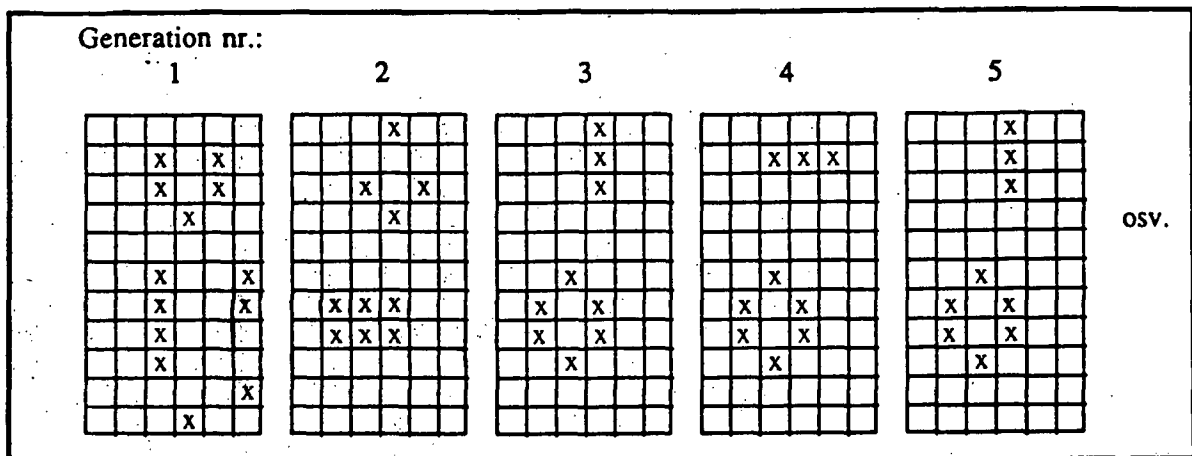
- En bakterie overlever kun, hvis den har 2 eller 3 naboer.
- På en tom gitterplads med netop tre naboer vil der blive "født" en ny bakterie.

Disse regler vil kunne give anledning til visse stabile konfigurationer (se fig. 1.2), som vil være stabile, når først de er dannet.

Cellulære automater er, som her beskrevet, en deterministisk simuleringsmetode, da reglerne giver en entydig udvikling af simuleringen – men modsat vores andet deterministiske eksempel, er rummet og tiden diskret, eftersom rummet er et gitter, hvor gitterpunkterne samtidigt opdateres efter faste tidsskridt. Dette hænger sammen med, at dynamikken af den model, som simuleres, er diskret, idet man ikke forestiller sig, at systemets tilstand ændres imellem hvert tidsskridt.

En anden egenskab ved dette eksempel, som adskiller det fra vores første eksempel på en deterministisk simulering, er, at systemet her er tidsligt irreversibelt. Dette ses ved, at de stabile konfigurationer, der kan opstå, ikke vil blive ustabile – selvom man lader tiden løbe baglæns.

Som antydnet ovenfor behøver cellulære automater ikke at være deterministiske, idet man kan



Figur 1.2. Dannelse af stabile konfigurationer i en cellulær automat. De sidste generationer af bakterier er ens, og således vil det fortsætte.

have stokastiske elementer i reglerne, der definerer dynamiken. I det hele taget er cellulære automater et godt eksempel på, hvordan man kan opstille sit helt eget modelunivers, som man så kan "lege" med.

Brownske bevægelser.

I den Brownske dynamik styres systemet af tilfældige kræfter. Et eksempel på Brownsk bevægelse kan være blomsterpollen i et glas vand. Partiklen vil påvirkes af stød fra vandmolekylerne og bevæge sig efter denne påvirkning. Til simuleringen af denne partikels bevægelser vil det være uoverkommeligt at simulere alle vandmolekylernes bevægelser for at finde deres påvirkning af partiklen. I stedet for indfører man en tilfældig kraft, som repræsenterer vandmolekylernes tilfældige stød. Dermed har man sparet det store regnearbejde, det er at integrere sig frem til de mange molekylers bevægelser.

Denne simulering vil bestå i at integrere sig frem efter partiklens bevægelsesligning, i dette tilfælde hedder denne specielle ligning Langevin-ligningen.

$$m \frac{dv}{dt} = R(t) - \eta v$$

$R(t)$ betegner den tilfældige kraftpåvirkning fra vandmolekylerne, og η betegner en hastighedsproportional gnidning.

Systemet simuleres med konstant temperatur. Denne indgår i simuleringen på den måde, at den tilfældige kraft, R , vælges som Gaus-fordelingen med spredningen:

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\eta k_B T}{\Delta t}}$$

...hvor k_B er Boltzmanns konstant, T er temperaturen og Δt er det anvendte tidsskridt.

Simuleringen vil være kontinuert i både tid og rum, da vi i simuleringen udnytter at tids- og stedkoordinaterne er reelle tal, for at få en så stor lighed med virkeligheden som muligt. Her kan man se parallellen til Molecular Dynamics, som også består i at integrere bevægelsesligningerne for partikler. Men i modsætning til Molecular Dynamics har simuleringen stokastiske træk, idet vandmolekylernes mange frihedsgrader er erstattet af den tilfældige kraft.

Af dette eksempel kan vi lære at grænsen mellem stokastiske og deterministiske simuleringer kan være svær at trække.

Kildefortegnelse.

- 1) Stewart V. Hoover: "Simulations: a problem-solving approach.", Addison-Wesley Publishing Company 1989.
- 2) Dieter W. Heermann: "Computer Simulation Methods, in Theoretical Physics", Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1990, Second Edition.
- 3) Wm. G. Hoover: "Molecular Dynamics", Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1986.

Kapitel 2.

Computersimuleringens historie.

Vi vil i dette kapitel belyse computer simuleringens historie, både på hardware- og algoritme-siden, da begge dele er vigtige for en effektiv simulering.

Ved at kende computerens og simuleringens historie kan vi bedre vurdere, hvor vi står i dag, og hvad fremtiden vil bringe. Samtidig giver det os mulighed for at studere fysikerens arbejdsforhold og arbejdsmetoder op gennem tiden.

Sidst, men ikke mindst, synes vi, som fysikstuderende, at det er interessant at betragte den historiske udvikling indenfor fysikken.

Kapitlet starter med en gennemgang af de vigtigste personer og begivenheder på hardware siden, hvor vi har forsøgt at beskrive hvilke simuleringer, der blev foretaget på de enkelte computere. Herefter følger to afsnit, der omhandler udviklingen af de to vigtigste simuleringsmetoder indenfor statistisk mekanik, og hvad de er blevet brugt til.

Hardware historie.

Det følgende skal belyse, hvor lang tid simulering har været mulig, hvor store beregninger man har kunnet foretage, og hvad man kan forvente i fremtiden.

Langt tilbage i historien har der eksisteret ideer om mekaniske regnemaskiner; Pascal (1654-1705), Leibniz (1646-1716) og ikke mindst Babagge (1792-1871) har arbejdet med emnet.

En af de seneste og mest avancerede mekaniske regnemaskiner blev bygget på Bell Laboratories, New Jersey i 1937-38. Maskinen var opbygget af elektro-mekaniske relæer, der ikke er nær så hurtige som radorør og de senere transistorer. Den blev bl.a. brugt til bestemmelse af ledningsevnen i kabler, hvilket indebærer beregninger med komplekse tal [1]. Da et relæ enten kan være åben eller sluttet, var det meget naturligt, at talrepræsentationen i maskinen var binær og ikke decimal (10-talssystemet).

Bell Laboratories har haft stor indflydelse på computerhistorien, men den største rolle har militæret spillet. Under både Anden Verdenskrig og den efterfølgende kolde krig blev der postet enorme summer i militæret, og de havde god brug for computere til forskellige formål. Man brugte f.eks. computeren til at udarbejde ballistiske tabeller. Når man var i felten måtte man have tabeller til at forudsige missilers bane ud fra vindhastighed, afstand til målet osv. En anden brug af computeren så man under krigen i Blechly Park, England, hvor man i 1942 udviklede den første kendte elektroniske regnemaskine - COLOSSUS.

Hovedmanden bag COLOSSUS var britten Alan Turing [2], som i 30'erne var den første, der

udviklede en matematisk teori for princippet i en generel algoritmisk beregningsmaskine. Hans teorier er en af grundpillerne for vore dages computere [6].

COLOSSUS brugte 2000 radorør og var udviklet i England med det formål for øje at bryde de tyske koder, som blev opfanget med radio. Dens opgave var, at foretage "intelligente" gæt på hvilke ord en kodemeddelelse indeholdt. Gode gæt ville eliminere mange kombinationsmuligheder og dermed gøre det lettere at "knække" resten af meddelelsen. Selvom COLOSSUS var bygget til et specielt formål, var den til en vis grad en "generel purpose"-maskine, da den arbejdede efter den generelle Boolean formalisme; opkaldt efter George Boole, der i 1854 opfandt den logiske algebra [1 & 25].

Den væsentligste forskning i computere foregik i USA. Militæret afsatte store summer til det såkaldte Manhattan-projekt, hvis hovedformål var at udvikle atombomben, og efter krigen brugte man computere til at udvikle brintbomben.

I Manhattan-projektet ville man, som supplement til eksperimenter, også beregne hvad der skete inde i en klump radioaktivt materiale. Derfor ville man lave beregninger på neutron-diffusion, og på hvad der skete, når man med sprængstof udsatte radioaktivt materiale for stort tryk. Den første af hærens maskiner hed ENIAC. Den blev færdig i 1946 på the Moore School under universitetet i Pennsylvania. Bogstaverne i navnet står for Electronic Numerical Integrator And Computer, hvilket fortæller at et af hovedformålene, var at løse differentiaalligninger. Endelsen, IAC, går igen i de efterfølgende computers navne. Disse computere var de første, hvorpå man numerisk kunne løse differentiaalligningsmodeller og dermed udføre egentlige computersimuleringer.

ENIAC havde ikke det, vi i dag kalder en CPU men et helt batteri af forskellige sammenkoblede enheder, hver med deres egen aritmetiske funktion, samt en masterenhed, der sørgede for den rette rækkefølge af operationer. Den indeholdt 18000 radorør, men modsat andre var de sat sammen i par, således at der løb strøm igennem den ene af dem og ikke "enten/eller"-strøm. Desuden adskilte ENIAC sig fra andre computere ved, at den ikke arbejdede med en binær talrepræsentation men derimod med en decimal talrepræsentation. 10 af de ovennævnte rørpar blev sat sammen i en ring. En sådan ring udgjorde et ciffer. Disse ringe var igen sat sammen, således den første ring repræsenterede "enere", den anden ring "tiere", den tredje ring "hundreder" etc., op til ti cifre [2].

Meget af hærens forskning foregik på Los Alamos, New Mexico, som var hovedforskningscenteret i Manhattan-projektet. I begyndelsen af Anden Verdenskrig blev beregningerne, for de flestes vedkommende, udført af kvinder - på manuelle bordregnemaskiner. I 1944 blev det foreslået, at man skulle anskaffe computere til Los Alamos. De første var IBM maskiner, men senere udviklede man sine egne maskiner [1].

MANIAC var en computer, der blev bygget i Los Alamos. Den påbegyndtes i 1948, men var først funktionsdygtig i 1952. På denne computer blev der udført flere bemærkelsesværdige simuleringer. Nicolas Metropolis udførte de første simuleringer med sin nyudviklede algoritme i 1952, hvilket giver algoritmen navnet Metropolis-algoritmen [7]. Simuleringen af Fermi, Ulam og Pasta, som omtales i afsnittet "Molecular Dynamics-metodens historie", blev også udført på denne computer. Det var også på denne maskine, at det første computerskakspil blev kørt. Man spillede på et 6*6 bræt, idet løberne var taget ud, så udregningerne blev over-

kommelige [1].

John von Neumann lagde navn til den første computer med det design, som vi kender i dag. Den hed JOHNNIAC, og var den første computer af den såkaldte Princeton-type, der stort set havde den samme arkitektur som vore dages PC'ere. JOHNNIAC havde en "Mean Free Time Before Failure" (MFTBF) på 10 min. MFTBF er den tid, som der i gennemsnit går, fra et program startes, til der opstår en fejl. Statistisk set var der altså stor sandsynlighed for, at computeren havde begået en fejl, hvis ens beregninger varede over 10 min. Det blev naturligvis bedre med tiden; den samme computer opnåede en MFTBF på 100 timer [4]. Disse regnefejl var et stort problem ved radiorørene, men i slutningen af 50'erne fremkom transistorerne, hvorefter sikkerheden steg så betydeligt, at det ikke længere udgjorde et problem.

I 1970 blev den første microprocessor udviklet af Texas Instruments til brug i det amerikanske rum-program og militær [22]. Med mikroprocessorerne blev computeren komprimeret betydeligt, men princippet forblev uændret. Således kan en microprocessor på størrelse med en fingernegl bestå af tusinder af transistorer. Med udviklingen af mikroprocessoren blev computerne så billige, og kom til at fylde så lidt, at det blev normalt for almindelige mennesker at eje en. Med fremkomsten af den Personlige Computer (PC'eren) i starten af 80'erne, kunne man udføre beregninger, som tidligere var forbeholdt et fåtal forskere.

Opbygningen af JOHNNIAC var, ligesom PC'ere og de fleste andre computere, seriel, hvilket betyder, at de udfører én operation af gangen. Det problem man er stødt på i udviklingen af disse maskiner, er den såkaldte von Neumann flaskehals. Dette betyder, for at sige det kort, at informationen mellem lageret og processoren hober sig op. Selve processoren er hurtig nok, men den kan ikke nå at udveksle information med lageret i en sådan grad, at den kan udnytte sig selv optimalt.

For at afhjælpe von Neumanns flaskehals, har man udviklet en såkaldt pipeline, hvis formål er at udnytte computeren optimalt. Man kan forestille sig en række operationer, som skal udføres på flere tal. Operationerne bliver udført af specielle hardwareenheder – f.eks. er der en enhed til at lægge sammen og en enhed til at trække fra. Ideen i en pipeline er, at disse enheder skal arbejde samtidigt, i stedet for én ad gangen.

Vi forestiller os, at vi har 2 operationer, som vi skal udføre på 2 tal. Først udføres 1. operation på 1. tal, dernæst 2. operation på 1. tal; men nu er 1. operation ledig, så samtidigt med at 2. operation udføres på 1. tal, udføres 1. operation på 2. tal. Til sidst udføres sidste operation på 2. tal, således at vi er færdige på 3 skridt (se fig. 2.1) – i stedet for 4 skridt som i en normal sekventiel udførsel (se fig. 2.2).

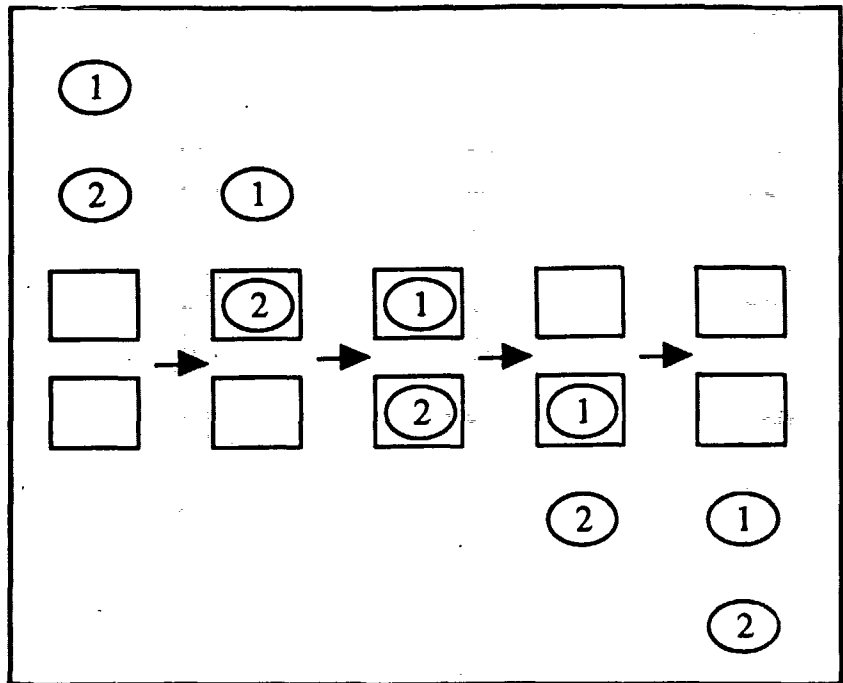
Pipeline-princippet er brugt i almindelige PC'ere, men er specielt udnyttet i de store vektorprocessorer. Som navnet antyder, er disse processorer specielt udviklet til at regne på vektorer. Sammenligner man regnehastighederne på en vektorcomputer og en almindelig computer, vil man se at jo flere tal, der er i ens vektor, jo mere overlegen bliver vektorcomputeren. Er der for få tal i ens vektor bliver vektorcomputeren langsommere, hvilket hænger sammen med, at vektorcomputeren bruger tid på at samle sin vektor i en buffer,

før operationerne bliver udført. Disse opstartsoperationer tager en større procentdel af bereg-

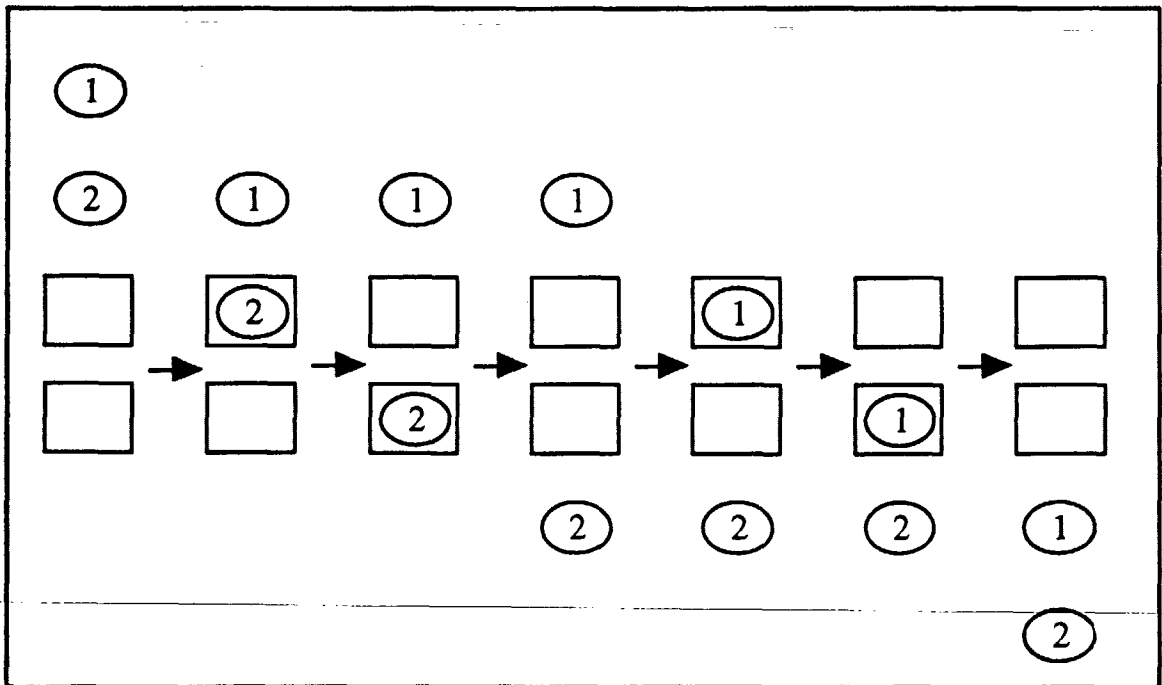
ningstiden, jo mindre ens vektor er [8].

I fysikken ser man tit problemer, der kan beskrives i vektorer. Foretager man f.eks. en simulering af en gas, opskrives impulsene af molekylerne i én vektor, og stedet for dem i en anden.

En anden mulighed for optimering af computeren, er at specialisere den. Denne specialisering ser man f.eks. i Santa Barbara-processoren, som blev specielt udviklet til at simulere den 3-dimensio-



Figur 2.1. Pipelining-princippet.



Figur 2.2. Normal sekventiel proces.

nelle Ising-model. Processoren blev bygget omkring 1982, og kostede en brøkdel af, hvad supercomputerne på den tid kostede. Den regnede hurtigere på Ising-modellen, end en supercomputer, programmeret i FORTRAN, kunne [3]. Til gengæld kunne den ikke regne på andre modeller, men hvad gør det hvis Ising-modellen er ens store interesse.

En af de drivende kræfter indenfor computerudviklingen er forskernes stadige hungren efter beregningskraft. Med mere beregningskraft kan man opnå større og mere virkelighedsnære

beregninger, og derved i højere grad få styret sin naturlige nysgerrighed. Igennem hele computerens historie er beregningshastigheden steget med en faktor 10, hvert femte år [5]. Man har ofte i medierne hørt, at udviklingen ikke kunne fortsætte, men der er ikke tegn på, at udviklingen vil sløje af.

For at opnå større regnekraft satser man i dag på at udvikle parallelle computere, og det er dette, der fortsætter den eksponentielle udvikling. Konceptet er her et andet: hvor man før havde en enkelt processor til at foretage alle udregningerne, én efter én, har man mange processorer til at regne samtidigt.

De begænsninger der evt. vil komme, bliver sandsynligvis af mere praktisk art. For det første kræver udviklingen af hurtigere computere utroligt mange penge, som kun få store private selskaber kan klare (hovedsageligt japanske). For det andet er man ikke kommet så langt mht. udviklingen af algoritmer, der kan klare den opdeling af problemet, som supercomputernes parallelle arkitektur kræver. Det er nemlig ikke blot et spørgsmål om optimering mht. højeste hastighed, men også et om brugervenlighed. Mange processorer gør en implementering (og compileren) mere komliceret. Derfor spår nogle forskere at man vil se en specialisering af parallelle computere; dvs. computere, der er designet til at bruge bestemte algoritmer i forbindelse med et snævert problemfelt, der netop er egnet til at blive løst på den type maskine. En følge af dette er, at man i mange år frem vil se, at den konventionelle computer vil sameksistere med de parallelle, da denne er mere velegnet som en "generel purpose" maskine. Endelig er man ved at nå en fysisk grænse. Nogle forskere er gået bort fra at anvende silicium som processormateriale og over til galliumarsenid, da elektrontransporten herved bliver hurtigere og varmeudviklingen mindre. Man er også ved at nå en grænse for, hvor kompakte man kan lave processorerne, idet man er nået ned til størrelser, hvor kvantemekaniske effekter kan spille ind [18 & 19].

Vi har gennem hele dette afsnit nævnt supercomputere, og med supercomputer menes den, til det omtalte tidspunkt, hurtigste computer. Men vi må også nævne, at mange mennesker i dag har deres egen computer - incl. studerende. For forskere er PC'ere eller de større "Workstations" et godt alternativ til supercomputerne. Mange simuleringer kan laves på de mindre computere, fordi man har eneret på hele maskinens regnekraft. Har man sin egen computer, er der ikke nogen udgift i at foretage beregninger, hvilket også giver en frihed på det økonomiske område.

I indledningens definition af simulering blev der skelnet mellem deterministiske og stokastiske metoder. To af de mest benyttede algoritmer, indenfor hver metode, kaldes henholdsvis Molecular Dynamics og Monte Carlo. Vi vil i det følgende beskrive deres historie og indenfor hvilke felter de benyttes, for at man derigennem kan bedømme deres stærke og svage sider.

Molecular Dynamics-metodens historie.

Simuleringsmetoden, Molecular Dynamics, hører under den del, der kaldes deterministiske, kontinuerte simuleringsmetoder, hvor man bruger en numerisk løsning af differentiaalligninger til at beskrive systemet. Mange systemer kan beskrives på denne måde, men Molecular Dynamics-metoden koncentrerer sig om mikroskopiske systemer, dvs. systemer af partikler. I bogen: "Computer Simulation Methods in Theoretical Physics" gives der et forslag til en definition af Molecular Dynamics:

"Molecular Dynamics metoden beregner faserumsbanerne af en samling molekyler, som hver især opfylder de klassiske bevægelseslove" (frit oversat).

Med andre ord får hver partikel, i det system man vil simulere, tildelt en begyndelses sted- og impuls- vektor. Disse begyndelsesbetingelser kan være kendt på forhånd eller tilfældige. I den efterfølgende simuleringskørsel undersøges partiklernes bevægelsesbaner vha. de klassiske bevægelseslove. De makroskopiske egenskaber af interesse findes herefter som en *tidsmidling* af disse partiklers bevægelsesbaner.

Med udviklingen af computeren kom muligheden for at studere irreversibilitets-paradokset, der havde fascineret Boltzmann, idet man nu kunne studere forholdsvis komplicerede systemer. Paradokset er, at mangelegemesystemer, fra en makroskopisk synsvinkel, udviser *irreversible* egenskaber (beskrevet med termodynamikens 2. lov), men udviser *reversible* egenskaber fra en mikroskopisk synsvinkel (beskrevet med bevægelsesligningerne) [11].

Boltzmann's paradoks er dog ikke noget paradoks, når man har forstået termodynamikken ordentligt. Irreversibiliteten i termodynamikken betyder, at hvis man har et system i en usandsynlig tilstand, er chancen for at vende tilbage til denne usandsynlige tilstand, når man først har forladt den, ikke særlig stor. I termodynamikken påstår man at systemerne er irreversible – men over en stor tidshorison, typisk mange gange universets alder, vil systemet vende tilbage til den usandsynlige tilstand. Dette betyder altså at systemer i teorien er reversible, men i praksis er de irreversible.

En af de første til at udnytte de nye muligheder var Enrico Fermi, der i 1952 på Los Alamos sammen med Pasta og Ulam benyttede MANIAC til at studere henholdsvis 16 og 32 koblede pendulers, søgning mod termodynamisk ligevægt. Fermi ville vise at den stigning i entropien i isolerede systemer, der kan forudsiges med termodynamikens 2. lov, følger af Newtons mekanik [11].

Fermi udførte eksperimentet sammen med Pasta og Ulam og fandt i første omgang en langsom, periodisk søgning mod ligevægt – men det viste sig senere, at pendulerne ikke gik mod ligevægt, idet de over lange perioder igen nærmede sig startkonfigurationen. Dette skyldtes, at modellen Fermi, Pasta og Ulam anvendte var for simpel til, at den statistiske mekanik kunne anvendes på den.

Molecular Dynamics som computersimuleringsmetode slog først for alvor igennem i 1957, da det lykkedes Berni Alder og Tom Wainwright på Lawrence Radiation Laboratory, Livermore, Californien, at løse et problem indenfor den statistiske mekanik, som var fremme i 50'erne. Det gik ud på, hvorvidt en væske/fast stof- overgang kunne forekomme i et system bestående af hårde kugler. Den skumle bagtanke med dette forsøg var den samme, som Fermi havde

haft: Kan årsagen til den irreversibilitet, som termodynamikens 2. lov dikterer, forudsiges af Newtons ligninger eller ej?

Modsat Fermi og hans medarbejders computereksperiment lykkedes det for Alder og Wainwright at få deres simulerings resultater til at stemme overens med termodynamikens 2. lov. Det var på den tid et resultat, der gav anledning til en del spekulationer, idet man ikke var klar over, at forklaringen lå i de objekter, som de to eksperimenter var udført på; de hårde kugler har noget der kaldes for Lyapunov-ustabilitet¹ "indbygget", mens de koblede penduler ikke har det.

Det var for øvrigt meget typisk, at det var væsker og gasser, der blev simuleret ved hjælp af Molecular Dynamics-metoden. Før det blev muligt at lave disse computereksperimenter, var det svært at teste teorierne omkring væsker og gasser på en tilfredsstillende måde. Det har taget lidt længere tid for simulering at slå igennem indenfor faststoffysik (krystallinske materialer). I 1959 blev der dog også foretaget en computersimulering indenfor dette område, af A. Vineyard og hans medarbejdere J.B. Gibson, A.N. Gotland og M. Milgram på Brookhaven Laboratory, Long Island, New York, der vha. en Molecular Dynamics-simulering undersøgte strålingsskade-kaskader i kobber. Disse undersøgelser har haft en vis betydning for designet af atomkraftsreaktorer.

I forbindelse med disse simuleringer hører der en lille historie, som viser lidt af den holdning til computersimulering, der var blandt forskerne på den tid. Vi lader Vineyard selv fortælle, og kommer ind på et tidspunkt, hvor det er ved at gå op for forskerne, at problemet med bestrålingsskader i metal er for komplekst til at blive løst analytisk:

"På et tidspunkt fremkom den idé, at en computer mere detaljeret kunne beskrive, hvordan strålingsskader rent faktisk foregår. Vi begyndte at småskændes, idet nogle påstod, at det ikke kunne lade sig gøre på en computer; andre at det ikke var nødvendigt. John Fisher insisterede på at problemet kunne løses i hånden, og han blev tirret til at love at demonstrere det. Han gik herefter ind på sit kontor for at arbejde. Den følgende morgen bad han om lidt mere tid, og lovede at sende mig resultaterne, så snart han kom hjem. Da jeg ikke havde hørt fra ham i ca. 2 uger, ringede jeg hjem til ham, og han indrømmede, at han havde givet op. Dette fik mig til, mere intensivt, at spekulere på hvorledes man kunne få en high-speed computer med i legen...." (frit oversat fra Vineyards selvbiografi) [7].

En af de vigtigste computersimuleringer med Molecular Dynamics-metoden, blev foretaget i 1964 i Argonne National Laboratory, Illinois, af Anees Rahman. Det var en simulering af

¹Lyapunov-ustabilitet giver sig udslag i, at forskellen mellem faserumstrajektorierne for partikler, der har de samme begyndelsesbetingelser, vokser som $e^{\mu t}$, hvor μ er den såkaldte Lyapunov-eksponent.

flydende Argon. Det var med periodiske randbetingelser² og var rimeligt ambitiøst, idet han anvendte 864 partikler, hvilket i lang tid var verdensrekord. Det var det første forsøg på at studere væskefysik med kontinuerte potentialer, hvor han forsøgte at uddrage information om gassens struktur som sammenligningsgrundlag for almindelige eksperimenter. Den artikel om arbejdet, der udsendtes samme år (1964), viser at Molecular Dynamics kan bruges til at opnå en bedre forståelse for eksperimenter med væsker (flydende Argon) og de mikroskopiske egenskaber væsker besidder. Desuden har hans arbejde medvirket til, at eksperimentalfysikere i almindelighed er blevet overbevist om computersimuleringens berettigelse og værdi [7].

Betydningen af Rahman's arbejde sættes i perspektiv, når det oplyses, at der blev holdt et særligt møde på Argonne National Laboratory i 1984 i anledning af 20 års jubilæet for artiklens udgivelse.

De 4 ovennævnte arbejder var med til at danne grundlaget for det, vi i dag kalder Molecular Dynamics.

I dag bruges Molecular Dynamics-metoden i computersimulering på stort set samme måde, som da det hele startede. Dog har den øgede computerkraft medført, at mere realistiske modeller kan simuleres. Dette hænger sammen med, at man kan lave simuleringer med et meget større antal partikler, så man nærmer sig et antal der kan sammenlignes med det man arbejder med i laboratorier. Det er en sådan situation, der menes, når man taler om den termodynamiske grænse. Et berømt eksempel på dette er den simulering, som Farid Abraham og hans samarbejdspartnere lavede i 1985 af kryptonatomer absorberet på grafit. Det specielle ved denne simulering var antallet af partikler: 161.604. Det er i den samme størrelsesorden som i de tilsvarende konventionelle eksperimenter. I simuleringen så man, hvordan krypton-gassen dannede en celleformet struktur på grafitoverfladen.

De langt mere realistiske computersimuleringer af virkelige systemer har medført, at det ikke kun er fysikken, der har glæde af dem. Indenfor kemi og biokemi er computersimuleringer af Molecular Dynamics-typen en stor hjælp, og der bliver i dag foretaget store simuleringer af kemiske reaktioner; f.eks. ved enzym-reaktioner i vandig opløsning [7] eller af komplekse molekylestrukturer, f.eks. i lange fedtsyrer med faseovergange i vand [20]. Med fremkomsten af parallelt arbejdende computere, har fysikerne fået et kraftigt værktøj, som vil hjælpe med til at udforske områder bl.a. indenfor kvantemekanikken.

For øjeblikket er man i gang med udforske områder indenfor ikke-ligevægtssystemer, hvor den traditionelle statistiske mekanik ikke giver en tilfredsstillende beskrivelse. Målet er at udvikle en teori, der kan bruges i analyse og kontrol af fysiske processer langt fra ligevægt [11].

²Man forestiller sig, at man har molekylerne i en kasse. Når et molekyle bevæger sig ud gennem en af siderne kommer det ind igen i den modsatte side, med samme impulsvektor.

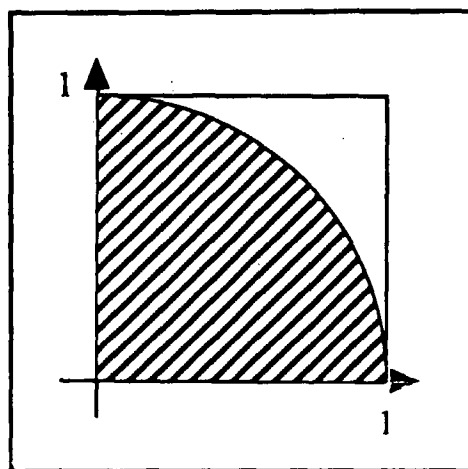
Monte Carlo-metodens historie.

Monte Carlo-metoden bygger på, at man vha. tilfældige tal danner en lang række mikrotilstande med en given sandsynlighedsfordeling, og ud fra en *midling over disse mikrotilstande* beregner statistiske værdier for systemets makroskopiske størrelser. Det er således en stokastisk simulationsmetode, jvf. indledningen.

Den bagvedliggende metode for Monte Carlo er ikke ny, da det i princippet var den samme metode, som den franske naturvidenskabsmand G.L.L. Buffon i 1773 benyttede til at bestemme π eksperimentelt. Han tegnede en kvart cirkel, med radius 1, i et koordinatsystem, og udenom den kvarte cirklen tegnede han en kvadrat med sidelængden 1 (se fig. 2.3). Brøkdelen af tilfældigt valgte punkter i kvadratet, som er indenfor cirklen, er lig $\pi/4$, hvorved π kan beregnes [21].

I 1933 benyttede Enrico Fermi Monte Carlo-metoden til, manuelt, at udregne, hvordan en neutron bliver stoppet af et stof. Dette var på et tidspunkt, hvor metoden endnu ikke havde fået sit navn, eller var blevet formuleret formelt [16].

Det var først i 1947 [12], med opfindelsen af den digitale computer nogle år tidligere, at metoden blev praktisk anvendelig. For at få en god Monte Carlo-simulering af selv et meget simpelt problem, skal man lave en enorm mængde beregninger, da den relative usikkerhed er omvendt proportional med \sqrt{n} , hvor n er antal Monte Carlo step.



Figur 2.3. $\frac{1}{4}$ enhedscirkel til bestemmelse af π .

Selve Monte Carlo-metoden blev opfundet af Stan Ulam i 1946, da han, mens han var syg, lå og spillede solitaire (7-kabalen). Han fandt ud af at det var nemmere, hvis man ville kende sandsynligheden for udfaldet af spillet, at lave en række prøvespil end at udregne alle kombinationsmulighederne og deres sandsynligheder. Han indså hurtigt, at dette kunne overføres til hans arbejde vedrørende neutrodiffusion [10].

Metoden er første gang nævnt i et brev fra Ulam til von Neumann [12]. Von Neumann var matematiker og arbejdede, ligesom Ulam, på at udvikle atombomben i det amerikanske forsvars forskningscenter i Los Alamos. At Monte Carlo-metoden kom frem på netop dette tidspunkt, skyldes uden tvivl, at man på grund af Anden Verdenskrig var meget presset i den militære industri for at fremstille nye våben, og et simuleringsredskab, som Monte Carlo, var et stor skridt fremad [23].

Selvom det var Ulam, der var den egentlige ophavsmand til metoden, får von Neumann en stor del af æren for dens opfindelse, da det var ham, der videreudviklede den, og fik sat tingene i system [10].

Alt dette arbejde var af naturlige grunde klassificeret som hemmeligt, og navnet Monte Carlo opstod som et kodeord, men det henviste samtidig til byen Monte Carlo, som er kendt for sine mange spillekasinoer – med spil, der indeholder elementer af tilfældighed, ligesom Monte

Carlo metoden.

Den første Monte Carlo-simulering på en computer blev foretaget i 1947 af et hold forskere på Los Alamos under ledelse af Nicolas Metropolis. Man simulerede kædereaktioner i et kritisk system af neutroner fordelt i rummet, og det blev kørt på ENIAC [10].

Monte Carlo metoden var oprindeligt kun beregnet til at behandle statistiske problemer, men man begyndte også at bruge den til deterministiske problemer – såsom differentiaalligninger. Den første anvendelse af Monte Carlo på et deterministisk problem var da Ulam, von Neumann og Fermi i 1948 brugte metoden til at finde egenverdierne i Schrödingerligningerne for systemer, hvor man ikke kunne finde dem analytisk. Senere fandt von Neumann en metode til at løse hyperbolske differentiaalligninger vha. Monte Carlo. Dette var et vigtigt resultat, da det muliggjorde løsningen af ikke lineære ligninger.

På trods af at meget af det tidlige materiale var klassificeret, dukker der i begyndelsen af 50'erne en mængde sovjetisk litteratur op om Monte Carlo-simulering. Det skyldes formentligt at bare et lille rygte, kan have sat en hel bølge af opdagelser i gang, netop fordi Monte Carlo-metoden bygger på et kendt princip. Man kan dog ikke komme uden om at den sovjetiske efterretningstjeneste på dette tidspunkt var meget interesseret i alt, hvad det amerikanske militær foretog sig. Der foregik derfor en del spionage aktivitet på dette tidspunkt, hvor igennem mange af oplysningerne om Monte Carlo-metoden måske er sluppet ud til omverdenen. Således fik Sovjet deres atombombe færdig 3 år tidligere, end amerikanerne havde forventet, formentligt pga. spionage [24]. (Nu kan man spørge sig selv, hvordan amerikanerne kunne vide, at russerne byggede en atombombe).

Et essentielt element i Monte Carlo-metoden er de tilfældige tal. I de første computere var der ikke nogen tilfældighedsgenerator, så man måtte selv generere nogle tilfældige tal på forskellig vis. I starten gjorde man det simpelthen manuelt, bl.a. med en snurretop, der var delt ind i et vist antal lige store felter. Når den faldt til ro, var ens tilfældige tal, f.eks. det tal, der vendte nedad. Senere gik man over til, først automatiske versioner af de mekaniske forsøg, og senere til rent elektroniske metoder, såsom tiden mellem radioaktive henfald [23]. Man fandt hurtigt ud af, at det var alt for langsomt at have tilfældige tal lagret på hulkort eller lignende, da f.eks. ENIAC brugte 600 millisek. på at læse et tal – men kun 3–4 millisek. på at udregne et. Man begyndte derfor at udvikle softwarerutiner til at generere tilfældige tal [10].

I vore dage benytter man udelukkende softwarerutiner til at generere tilfældige tal – eller pseudotilfældige tal, som det i virkeligheden er, da en talfølge i princippet altid vil være periodisk. Man har efterhånden udviklet så gode algoritmer, at perioden er meget længere end mængden af tal, som man skal bruge i sin simulering – selvom man f.eks. skal bruge 10^{10} tilfældige tal i sin simulering [9]. Vi har f.eks. set algoritmen til en tilfældighedsgenerator med en periode på 10^{36} [15]. Da computere i dag er blevet meget hurtige er det også et væsentligt krav til en tilfældighedsgenerator, at den er meget hurtig for ikke at sinke resten af beregningsarbejdet.

En anden udvikling indenfor Monte Carlo er udvikling af specielle computere til at køre Monte Carlo-simuleringer på, som f.eks. den tidligere omtalte Santa Barbara-processor. Når man laver en computer til kun at løse ét bestemt problem, kan man optimere computeren, så den bliver meget hurtig til netop dette problem; hastighedsrekorden for en Monte Carlo-simu-

lering er derfor sat på en sådan speciel maskine [13]. Problemet er dog, at disse maskiner er meget problem specifikke, forstået på den måde at, hvis man ændrer sit problem lidt, er maskinen måske pludselig meget langsom – hvis simulationen overhovedet kan lade sig gøre [13]. Det gør disse specialmaskiner meget dyre i forhold til, hvor mange forskellige problemer de kan løse, men billige i forhold til en generel supercomputer.

Normalt tænker man på Metropolis-algoritmen, når man taler om Monte Carlo-simulering, da det er denne, der er langt den mest udbredte og den mest generelle. Der findes dog flere varianter af Monte Carlo-metoden, som er mere velegnede til specielle problemer [13], men på grund af deres problemspecifikke karakter vil de ikke blive behandlet yderligere her. Generelt kan man dog sige, at der har været en stor udvikling i effektiviteten af algoritmerne, der bruges til Monte Carlo-simulering. Dette har betydet en stor hastighedsforøgelse af programkørslerne [13].

I starten var det kun muligt at foretage en kvalitativ analyse af et problem, da Monte Carlo-simuleringerne krævede meget regnekraft, men i dag hvor vi har meget kraftige computere til rådighed og specielt pga. udviklingen af vektor- og parallel-computere, er det også muligt at lave en kvantitativ analyse [13].

Monte Carlo-simulering bliver i dag brugt indenfor en bred vifte af felter indenfor fysik-, kemi- og ingeniør-videnskaberne, pga. dens generelle karakter. Mange af disse felter har haft en kraftig udvikling på grund af Monte Carlo-simulering. Et sådant felt er Quantum Chromodynamics (QCD) – en teori, der beskriver de stærke kernekrafter mellem kvarkerne, som udgør kernepartiklerne, såsom neutroner og protoner. Når man simulerer QCD har man altid indeholdt en form for sandsynlighed for kvarkernes interaktion, og det bliver derfor en stokastisk simulering, hvorfor Monte Carlo er et naturligt valg. Desuden er QCD præget af ikke lineære fænomener, som man ikke ville havde forstået uden Monte Carlo simulering [26].

I starten var der stor diskussion om hvilken simuleringsmetode, der gav de mest korrekte resultater: Monte Carlo eller Molecular Dynamics, idet man ikke kunne opnå de samme resultater, for ens problemer, med de to metoder. Problemet blev løst, da Alder og Wainwright lavede deres berømte simulering af en væske ved at skrive bevægelsesligningerne op for nogle hårde kugler – altså en Molecular Dynamics-simulering. Næsten samtidigt blev der lavet en simulation af samme problem med Monte Carlo og den gav det samme resultat. Det har siden vist sig, at hvis det kan lade sig gøre at simulere et problem med begge metoder, vil de give ens resultater, hvis den bagvedliggende teori forudsiger dette. Et sådant problem kaldes ergodisk, hvilket de fleste systemer er i praksis. Med ergodisk menes, at systemet kommer rundt på hele energifladen. Nogle parametre kan dog optræde som "afskærmning" for dele af denne energiflade hvilket betyder at systemet ikke er ergodisk. I en sådan situation, giver en tidsmidling af systemet (dvs. en Molecular Dynamics-simulering) ikke det samme resultat som en ensemblemidling af samme system (dvs. en Molecular Dynamics-simulering).

Nu kan man spørge sig selv: "Hvordan afgør man, hvilken simuleringsmetode man skal benytte – Monte Carlo eller Molecular Dynamics?". Hvis det kan lade sig gøre at opskrive bevægelsesligningerne for systemet, vil det være naturligt at benytte Molecular Dynamics. Med Molecular Dynamics får man mere information om systemet, da man udregner faserumskurverne for partiklerne. Med Monte Carlo kan man skyde en genvej, hvis man ikke har brug for al denne information, og derved undgå en masse "overflødige" beregninger. Nogle

gange kan det ikke lade sig gøre at opskrive bevægelsesligningerne for systemet eller på anden måde beskrive systemet med differentiallyigninger, og derfor må man ty til en statistisk metode såsom Monte Carlo. Generelt må man sige, at man ved at analysere sin simuleringsopgave må vurdere, hvilken simulerings metode, der er den mest gunstige – en deterministisk eller en stokastisk.

Hvis man skal give en overordnet beskrivelse af, hvilke emner de to metoder bruges til, kan man sige at Molecular Dynamics- og Monte Carlo- metoden har det til fælles, at de begge benytter en mikroskopisk beskrivelse til at finde makroskopiske egenskaber ved det system, som de beskriver. Men, modsat Monte Carlo, kan Molecular Dynamics bruges i tidsafhængige processer. Det er typisk transport og ikke-ligevægts processer (søgning mod ligevægt), som studeres. Man kan derfor umiddelbart tro, at Molecular Dynamics er Monte Carlo langt overlegen, men Monte Carlo har også sin force, da det ikke er alle systemer, som man kan beskrive ved differentiallyigninger. Samtidig er Monte Carlo-metoden ofte simplere at implementere. Typisk er de simuleringer man laver med Monte Carlo-metoden, systemer i ligevægt, men dette er ikke nødvendigvis en begrænsning, idet man kan konkludere på ikke-ligevægts situationer ud fra ligevægtssimuleringer vha. Fluktuations Dissipations teoremet (se appendix D).

Opsummering.

Hardwareudviklingen.

Fremkomsten af computeren kan ses som en kombination af flere faktorer. Selve ideen med den automatiske regnemaskine går tilbage til 1600-tallet. Det var først i 1930'erne, at Alan Turing udviklede ideen til teorien om den generelle algoritmiske regnemaskine. Under Anden Verdenskrig var stormagternes militære behov stort nok til, at der blev afsat økonomiske midler til forskning i udvikling af computeren. Samtidig blev det teknologiske niveau tilstrækkeligt højt til, at computeren kunne realiseres.

Under krigen havde man for alvor fået øjnene op for de muligheder, som computeren gav. Militæret afsatte store summer indenfor videreudviklingen af computeren, med fremstillingen af brintbomben som det endelige mål. Med overgangen fra radorør til transistorer i slutningen af 50'erne øgedes regnehastigheden og pålideligheden drastisk, samtidig med at priserne faldt. Først efter denne landvinding blev computeren, som simuleringsredskab, udvidet til videnskabelige formål, der var uafhængige af militære formål og midler.

Overgangen til brug af silicium-chips markerede overgangen til computeren, som vi kender den i dag. Forøgelsen af regnehastigheden, og specielt faldet i pris, betød fremkomsten af PC'eren. Det er nu almindeligt at en forsker har en kraftig PC eller en Workstation stående på sit kontor, udstyret med programmer, der gør den let at betjene. Samtidig med dette er den eksponentielle udvikling indenfor supercomputere fortsat. Dette betyder, at man idag har et vidt spekter af computere, der passer til forskernes forskellige behov, i modsætning til før i tiden, hvor man stort set kun havde en type computere, nemlig supercomputere.

Softwareudviklingen.

Umiddelbart virker det som om, udviklingen i simuleringsmetoder har været væsentligt mindre, end på hardware området; de simuleringsmetoder, der anvendes idag, er overordnet

de samme som i "pionertiden". Man skal selvfølgelig passe på, ikke at konkludere for meget ud fra det faktum, at Molecular Dynamics og Monte Carlo stadigvæk er de to dominerende simuleringsmetoder (indenfor statistisk mekanik); med de brede definitioner, der er af de to simuleringsmetoder, er der ikke så mange andre muligheder. Det må dog siges, at være ret interessant, at selve Metropolis-algoritmen, som idag nærmest er synonym med Monte Carlo, allerede blev udviklet i 1952.

Ovenstående skal selvfølgelig ikke forstås på den måde, at der ikke har været nogen væsentligt udvikling på softwareområdet. Det er blot ikke i så høj grad de basale algoritmer der er blevet udviklet, men mere andre faktorer, som f.eks. integrationsmetoder og tilfældighedsgeneratorer.

Simulering giver mulighed for at studere komplekse systemer.

Komplekse systemer er en betegnelse for studiet af systemer, der har en ikke-lineær beskrivelse. Det er en bedre og mere dækkende betegnelse for det, der er blevet kaldt kaos.

Før computerens fremkomst var fysikken præget af, at man kun kunne behandle problemer, der ikke krævede for megen regnekraft, fordi man var henvist til at løse beregningerne med "pen og papir". Man kunne således, i praksis, kun behandle problemer, hvortil der kunne findes en analytisk, evt. approksimativ, løsning. Den øgede regnekraft, som computerudviklingen medførte, gav nu mulighed for at man kunne integrere sig frem i tiden, eller på anden måde følge et systems udvikling i tid, hvilket kræver mange iterationer af ligningerne. Dermed gav computeren bedre mulighed for at løse problemer, f.eks. systemer med en ikke-lineær beskrivelse, som man ikke kunne løses analytisk, med numeriske metoder. På denne måde har man bevæget sig fra simple til komplekse systemer.

Indenfor de enkelte grene af fysikken har man fået mulighed for at behandle emner, som ikke kunne behandles uden simulering. Således har man i den statistiske mekanik kunnet observere sammenhængen mellem den klassiske mekanik på det mikroskopiske niveau, og termodynamikkens makroskopiske beskrivelser.

Simulering af store systemer.

Man er efterhånden i stand til at opnå mere kvantitative resultater, idet man kan simulere modeller, der er mere omfattende og komplicerede på det mikroskopiske plan. Tidlige simuleringer var ofte i 1 eller 2 dimensioner, eller kraftigt forsimplede. I dag kan man simulere systemer af samme størrelsesorden og natur, som de systemer man udfører eksperimenter på. Man kan derfor begynde at sammenligne simuleringresultaterne direkte med de resultater, der opnås i laboratoriet. Som resultat af dette er man kommet tættere på den termodynamiske grænse, hvor det simulerede system opfører sig efter den statistiske mekaniks love.

Simuleringer i denne størrelsesklasse foretages primært på nutidens supercomputere, idet de er meget beregningstunge.

Perspektivering.

Intet tyder på, at den eksponentielle vækst i computerkraften vil ophøre. For et par år siden mente man, at udviklingen indenfor supercomputere ville nå et mætningspunkt, men efter fremkomsten af de parallelle computere forventes fortsat vækst.

I en rapport fra "TeraFlop"-mødet på CERN, 27-28/11-1990 er der et skøn over, hvor meget beregningstid forskellige fysiske discipliner behøver for at opnå interessante resultater. I dette materiale er beregningstiden beskrevet i enheder af TFD (TeraFlopDays)³ og TFY (TeraFlopYears). Den store sværvægt på dette område er Quantum Chromodynamics (QCD), som behøver 1 TFY for at opnå interessante resultater, og 10 TFY for at opnå virkeligt spændende resultater. Flere andre discipliner har givet et bud på, hvor meget de kunne bruge, disse er dog alle under QCD, undtagen "kaotisk bevægelse" (meteorologi, turbulens osv.), som kunne ønske sig det næsten ubegrænsede 1000 TFY.

Vi kan altså konkludere, at forskerne i lang tid fremover har brug for den stadigt stigende computerkraft.

Der findes dog problemer, hvor den eksponentielle vækst i regnekraft er til ringe nytte. Det drejer sig om problemer, der beskrives ved algoritmer, hvis beregningstid stiger som $T = K \cdot r^n$, hvor T er beregningstiden, K og r er konstanter og n er f.eks. antallet af partikler i ens simulering. Hvis man for et sådant problem ønsker at øge antallet af partikler, for at nærme sig den termodynamiske grænse, vil beregningstiden stige eksponentielt med antallet af partikler, og meget hurtigt blive uoverkommeligt at beregne.

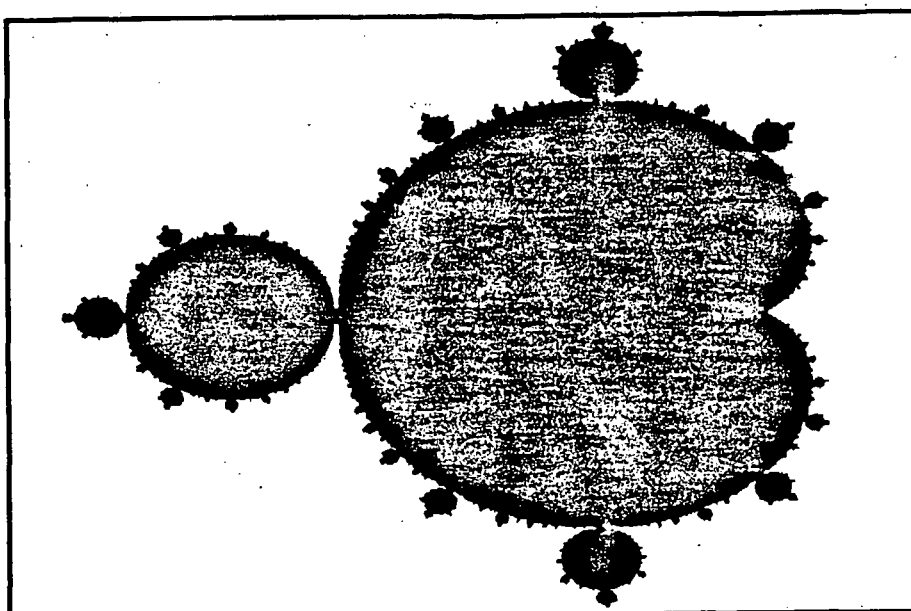
Et andet problem, der heller ikke kan løses af hurtigere computere er problemet med uberegnelighed. Et eksempel på et sådant problem er beregningen af Mandelbrot-mængden. Mandelbrot-mængden er en delmængde af de komplekse tal \mathbb{C} , for hvilken det gælder at talfølgen

$$Z_{n+1} = Z_n^2 + c, \quad Z_0 = 0 \quad (1)$$

... hvor c er et komplekst tal, ikke går mod uendelig. Dette kan også udtrykkes på den måde, at Z ikke kommer udenfor en cirkel, med radius $1 + \sqrt{2}$.

Altså: Mandelbrot-mængden er mængden af c for hvilket det gælder at Z, ikke kommer udenfor cirklen. Komplementet til Mandelbrot-mængden, lad os kalde den K, er mængden af c, for hvilke det gælder, at Z kommer udenfor cirklen.

³TeraFlop (TF) er en betegnelse for computeres regnehastighed, udtrykt i regneoperationer pr. sekund. Således står 1 TF for, at maskinen kan foretage 10^{12} regneoperationer pr. sekund.



Figur 2.4. Mandelbrot-mængden.

Hvis c tilhører K , kan en algoritme bare iterere sig frem til et Z_n der er udenfor cirklen, hvorved c 's tilhørsforhold til K er vist.

Spørgsmålet er nu hvordan man afgør hvilke punkter der er indenfor cirklen. Sikkert er det i hvert fald, at en algoritme ikke "bare" kan iterere x antal gange og på den måde konstatere om c tilhører Mandelbrot-mængden. Der er altid en risiko for at yderligere iterationer vil vise, at c ligger udenfor cirklen og dermed ikke tilhører Mandelbrot-mængden.

Ovenstående betyder bl.a. at når vi ser et computertegnet billede af Mandelbrot-mængden (se fig. 3.1), så betyder farverne sort og hvid følgende:

Hvid: Punktet tilhører K .

Sort: Punktet tilhører måske Mandelbrot-mængden, eller måske K .

At der er en (meget) store dele af det sorte område, som vi analytisk kan konstatere tilhører Mandelbrot-mængden, er en anden sag; Det "ved" vores algoritme nemlig ikke, den itererer bare!

Vil det så sige at Mandelbrot-mængden er uberegnelig, eller kunne man forestille sig at man kunne finde en anden algoritme der gjorde mængden beregnelig? Ja det kan man godt, men forskerne tror i dag ikke at det vil være mulig og Mandelbrot-mængden er derfor "mistænkt for at være uberegnelig.

Beregning af Mandelbrot-mængden er et eksempel på Turings stoppe problem, som handler om at man med nogle algoritmer ikke kan sige hvornår de er færdige eller om de nogensinde bliver det.

Turing var inspireret af Kurt Gödel som i 1931 formulerede en sætning som siger at man aldrig vil kunne bevise alt indenfor matematikken. Sætningen lyder: "En hvilken som helst

beskrivelse af et præcist matematisk system af aksiomer og procedureregler, forudsat beskrivelsen er bred nok til at indeholde simple aritmetiske sætninger og er modsætningsfri, vil altid indeholde sætninger eller påstande som ikke kan bevises værende sande eller falske".

Problemet med uberegnelighed er ikke noget vi har stødt på i vores undersøgelse af simulering indenfor fysikken men det kan meget vel tænkes at det med tiden bliver et reelt problem at visse ting simpelt hen ikke kan beregnes og så kan computerne være nok så hurtige.

Kildefortegnelse.

- 1) N. Metropolis, J. Howlett, Gian-Carlo Rota: "A History of Computing in the Twentieth Century", Academic press 1980.
- 2) Vernon Pratt: "Thinking Machines", Basil Blackwell 1987.
- 3) Jorge E. Hirsch: "Condensed matter physics", Physics Today, may 1983.
- 4) F.J. Gruenberger: "The History of the JOHNNIAC", Annals of the History of Computing, Juli 1979.
- 5) ComUNI●Cation, 1991.
- 6) Roger Penrose: "The Emperor's new mind", Vintage, Oxford university press 1989.
- 7) G. Cicotti, D. Frenkel og I.R. McDonald: "Simulations of liquids and solids. Molecular Dynamics and Monte Carlo methods in Statistical Mechanics", North-Holland 1987.
- 8) Jan A. Spriet og Ghislain C. Vansteenkiste: "Computer aided Modelling and Simulation", Academic Press 1982.
- 9) D.W. Hermann: "Computer Simulation Methods", Springer-Verlag 1989, 2. udgave.
- 10) William Aspray: "John von Neumann and the Origins of Modern Computers", The MIT Press 1990.
- 11) William G. Hoover: "Lecture Notes in Physics, Molecular Dynamics", Springer-Verlag 1986.
- 12) Hermann H. Goldstine: "The Computer from Pascal to von Neumann", Princeton University Press 1973.

- 13) Kurt Binder: "Topics in Current Physics: Monte Carlo Methods",
Springer-Verlag 1986.
 - 14) Steve J. Heims: "John von Neumann and Norbert Wiener",
The MIT Press 1980.
 - 15) Papir af Arif Zaman (arif@stat.fsu.edu) og George Marsaglia (geo@stat.fsu.edu),
Department of Statistics and Supercomputer Computations Research Institute, Florida
State University, Tallahassee, Florida, 1992.
 - 16) H.L. Anderson: "Scientific Uses of the MANIAC",
Journal of Statistical Physics, Vol. 43, 1986.
 - 17) James Gleick: "KAOS - En ny videnskabs tilbliven",
Munksgaard, 1.udgave 1. oplag 1989.
 - 18) Scientific American, Januar 1991, s.75 - s.83.
 - 19) BYTE, November 1988, s.275 - s.283.
 - 20) Interview med Søren Toxværd (se appendix A).
 - 21) IMFUFA-seminar med Eigil Præstgård om computersimulering.
 - 22) "Politikens Hjemmecomputerbog - computeren i hjemmet",
Politikens Forlag, 1984.
- Oversat og bearbejdet efter:
- H. Varley, I. Graham: "The Personal Computer Handbook",
Marshall Editions, London, 1983.
 - 23) K.D. Tocher: "The Art of Simulation",
The English Universities Press, 1963.
 - 24) Telefonsamtale med Hans Tornehave.
 - 25) H.B. Hansen: "Simula - et objektorienteret sprog",
Datalogi - kursustekst (modul 1), 2.udgave, RUC, 1991.
 - 26) Telefonsamtaler med Benny Lautrup.

Kapitel 3.

Interview og undersøgelser.

For at få en idé om, hvorledes fysikere arbejder med computere, har vi interviewet en række fysikere, der benytter simulering i deres arbejde. Endvidere har vi læst to undersøgelser, der omhandler forskeres brug af computere, foretaget i hhv. 1965 og 1991, samt en undersøgelse om computerens udvikling i Europa, nærmere betegnet EF, skrevet i 1991.

Vi er interesserede i kvalitative oplysninger om, hvorledes fysikerne arbejder med simulering – ikke i at lave statistik over hvor mange eller hvem, der arbejder på en bestemt måde. Derfor har vi valgt selv at foretage interviews, fremfor en spørgeskemaundersøgelse, da vi er af den overbevisning, at interviewformen er den bedste måde at gøre dette på.

Formålet med interviewene er at få indblik i, hvordan forskerne arbejder med simuleringer. Dette indbefatter overvejelser om, hvor meget tid de bruger på simuleringer, og hvilken vægt de tillægger arbejde udført på computeren. Ydermere er vi interesserede i at undersøge, hvilken indflydelse simulering har haft på genstandsområderne indenfor fysikken.

Undersøgelserne forsøger vi at sammenholde med hinanden for at få en idé om, hvilken indflydelse computerens udvikling har haft på fysikernes arbejdsmetoder. Endvidere vil vi sammenholde den holdning til simulering, som forskere giver udtryk for i undersøgelsen fra 1965, med den, der kommer til udtryk i vore interviews.

Det er tanken, at interviewene, sammenholdt med de nye rapporter, skal give os et indtryk af, hvad fremtiden vil bringe.

Interviews.

Først gennemgås hver enkelt af de interviewede, ganske kort, så personens faglige baggrund samt relevans for projektet rides op. Dernæst sammenfattes interviewene, med fokus på **arbejdsgangen med computeren, computerens påvirkning af fysikkens genstandsområder samt fremtidsperspektiverne indenfor begge emner.**

Det var fra starten vigtigt for os, både i projektmæssig sammenhæng og ud fra en fælles personlig nysgerrighed, at komme ud til så mange fagligt forskellige forskere som muligt.

Vi begyndte med nogle forskere fra vores eget miljø (RUC), idet vi dermed ville opnå en vis fortrolighed med interview-formen, inden vi kom ud i omverdenen. Vi afsluttede hvert interview med at få oplysninger om personer, der kunne være interessante at kontakte, fordi de benyttede simulering meget. På denne måde har vi fået interviewet en række forskere, som repræsenterer et bredt spektrum af simulering-metoder og fagområder.

Det må pointeres, at det ikke er et repræsentativt udvalg af danske fysikere, vi har interviewet. Især forskerne udenfor RUC er blevet udvalgt, fordi de har arbejdet/arbejder meget med simulering, og derfor forhåbentligt har nogle interessante synspunkter om emnet.

Kort om hver enkelt af de interviewede.

Tage Christensen (TC), IMFUFA, RUC.

Cand.Scient i fysik (1986).

Beskæftiger sig med eksperimentelt at bestemme amorfe stoffers egenskaber.

Bruger computeren til at løse ligninger analytisk, styring af eksperimenter, dataopsamling samt databehandling.

Egil Præstgaard (EP), Institut I, RUC.

Civilingeniør i kemi (1959).

Arbejder med fysisk kemi, bla. faseovergange i væsker, viskositet.

Har udført computersimuleringer siden 1970'erne, både MD og MC.

Jeppe Dyre (JD), IMFUFA, RUC.

Uddannet i matematik (1979) og fysik (1984).

Arbejder teoretisk med stokastiske modeller af amorfe stoffers fysik. Benytter udelukkende PC'ere til sine simuleringer.

Niels Boye Olsen (Boye), IMFUFA, RUC

Uddannet eksperimentalfysiker (1970).

Arbejder, i samarbejde med TC, med at fastlægge amorfe stoffers, specielt underafkølede væskers, egenskaber.

Bruger computersimuleringer på hjemmecomputer/PC'ere som et værktøj, for at opnå en kvalitativ forståelse af visse fænomener - en slags "selvundervisning".

Bruger, ligesom TC, computeren til forsøgsstyring, dataopsamling og databehandling.

Tomas Bohr (TB), Niels Bohr Institut, KU og

Mogens Høgh Jensen (MHJ), Nordita.

TB er uddannet i fysik og matematik (1980), og startede med at simulere i 1983.

MHJ er ligeledes uddannet i fysik og matematik (1981), og begyndte at simulere i 1982.

De arbejder begge indenfor kaosområdet, og prøver bla. at forstå begreber, som f.eks. turbulens, endnu bedre end man gør i dag.

De benytter computeren til numerisk løsning af differens- og differentilligninger i forbindelse med simuleringer, samt til at udføre komplicerede matematiske operationer.

Benny Lautrup (BL), Niels Bohr Institut, KU.

Magister i fysik (1965).

Er teoretisk fysiker, med interesse for computere.

Har siden 1980 udført adskillige simuleringer på supercomputere indenfor forskellige områder, bla. gitterfeltteorien og neurale netværk.

Ole Holm Nielsen (OHN), UNI•C.

OHN er Ph.D i fysik (1982).

Er i øjeblikket ansat som videnskabelig konsulent for brugere af UNI-C's parallelle super-computer CM-200, og deltager desuden i forskningssamarbejde med enkelte grupper - bla. Laboratoriet for Teknisk fysik ved DTH.

Arbejder med at finde frem til makroskopiske egenskaber ved materialer, f.eks. undersøges sintring af kobber. Til dette bruges MD tilkoblet kvantemekanik.

OHN foretager sine simuleringer på CM-200.

Åke Nordlund (ÅN), Astronomisk Institut, KU.

Er teoretisk fysiker, og har derudover Ph.D i astrofysik (1976).

ÅN beskæftiger sig med konvektion i stjernernes yderste lag.

Bruger supercomputere til sine simuleringer, der går ud på at løse en masse partielle differentiaalligninger.

Lavede sin første simulering i 1975-76.

Søren Toxværd (ST), Kemisk lab. III, HCØ.

Teoretisk kemiker (1966).

Beskæftiger sig med simulering af lange fedtsyre molekylestrukturer. Arbejder for tiden for NOVO i forbindelse med deres udviklings arbejde.

Har siden 1960'erne benyttet Molecular Dynamics.

Selve interviewet.

Hvert af de sammenlagt ni interviews varede mellem 1 og 2 timer. Næsten alle blev optaget på bånd, hvorefter et referat blev skrevet. Hver af de interviewede fik derefter tilsendt vores referat, med opfordring til at rette eventuelle fejl og misforståelser, hvilket vi fik stor respons på, idet næsten alle de interviewede kom med en tilbagemelding. Vi må således gå ud fra, at de interviewede kan stå inde for vore referater af deres interviews. Tolkningen af deres synspunkter står dog udelukkende for vores egen regning; derfor vil vi opfordre til, at referaterne, som er at finde i appendix A, læses.

For at fremme en vis standardisering af interviewene lavede vi et skema bestående af essentielle spørgsmål. Skemaet var ikke ment som et stringent spørgeskema, men derimod som en huskeseddel over de spørgsmål, der gerne skulle berøres.

Spørgsmål til interview.

Curriculum vitae:

- 1) Hvilken uddannelse har du?
- 2) Hvornår blev du færdig med uddannelsen?
 - a) Hvad har du beskæftiget dig med siden?
 - b) Hvornår kom computeren ind i dit arbejde?
- 3) Hvor lang tid har du arbejdet med computere?
- 4) Hvilke typer simulering har du beskæftiget dig med?

Computerens rolle i forskerens arbejde:

- 1) Hvordan indgår computere i dit arbejde?
 - a) Ideudviklende, bekræftende
 - b) Dataopsamler, måleredskab, databehandling
- 2) Hvor stor en del af din tid går foran computeren?
- 3) Hvordan er sammenhængen mellem dit arbejde ved computeren, eksperimentelt

arbejde og teoretiske overvejelser?

- 4) Har du brugt computeren til at give svaret på et problem – selvom problemet ikke var sværere, end at det kunne løses analytisk?
- 5) Har du ved brug af computeren opnået uforudsigelige resultater?
- 6) Hvilke krav stiller du til computeren?

Simuleringens rolle i videnskabshistorien:

- 1) Har brugen af computere ændret sig, indenfor de felter fysikeren arbejder med?
- 2) Har computeren medført en øget aktivitet indenfor visse forskningsområder og været en afgørende årsag til fremkomsten af nye?

Det ses, at spørgsmålene er delt op i tre grupper. Den første gruppe indhenter personlige data, således at vi kan placere den enkelte forsker i forhold til de andre, mht. alder, uddannelse og simulerings-erfaringer. Den anden søger at klarlægge, hvordan forskeren arbejder med simulering, og hvilken indflydelse arbejdet med simulering har på hans øvrige arbejde. Endelig i den tredje gruppe stiller vi nogle spørgsmål om udviklingen af fysikkens genstandsområder.

Sammenfatning af interviews.

Vi vil nu fremdrage de projektrelevante oplysninger og synspunkter, der er at finde i referaterne.

Som nævnt i indledningen kan simulering defineres på mange forskellige måder, men alle de simuleringer vi er stødt på igennem vores interviews, har været dækket af vores definition af simulering.

Arbejdsmetoder.

Tidsforbrug.

Hovedparten af de interviewede bruger, i hvert fald i perioder, en stor del af deres forskningstid foran en computer. Der er dog stor individuel forskel på computerens andel af den samlede forskningstid.

Der bliver for alles vedkommende, med TC og Boye som undtagelser, vekslet mellem at simulere intensivt i perioder, hvor imellem der arbejdes teoretisk. Der går typisk fra en måned til et halvt år mellem simuleringerne.

De to eksperimentalfysikere (Boye og TC) adskiller sig fra de øvrige ved deres konstante brug af computere i det eksperimentelle arbejde.

Forløbet af simuleringsfasen.

Der er hos de interviewede en klar enstemmighed omkring forløbet af simuleringsfasen.

Ved starten af en simulering har hver enkelt meget styr på teorien bag den opstillede model og en klar forventning om, hvad en simulering af denne vil resultere i. Den typiske simulering har således til formål at bekræfte forskerens forestilling om modellen.

Simuleringer kan udemærket give et resultat, der afviger fra det forventede, hvorefter man kan indgå i en mere idéudviklende fase. Her kan man så få ændret sin opfattelse af, hvad modellen betyder.

Det er meget sjældent at man får noget totalt uventet ud af en simulering. Med totalt uventet mener vi et resultat, som ikke kan forklares ved, at man gennemtænker sin simulering og den bagvedliggende teori en gang til. TB nævnte dog, at han havde simuleret en model af kemisk turbulens, hvorved der var fremkommet bundne tilstande af spiralbølger, hvilket stadig er teoretisk uafklaret.

Simuleringer bruges forskelligt.

De interviewede arbejder med simulering på mange forskellige niveauer.

Boye går ikke efter at producere videnskabelige resultater med sin simulering. Han anvender simulering som et værktøj til at opnå en kvalitativ forståelse af fænomener, som han støder på i sit arbejde, dvs. som en slags selvundervisning. Da Boye, som han selv siger: "Forstår tingene meget konkret", er simulering et meget effektivt værktøj for ham, da det fungerer som et bindeled mellem det konkrete og det abstrakte.

Heroverfor står de otte teoretikere, som alle bruger simulering til at producere videnskabelige resultater.

En anden forskel ligger i størrelsen af de computere, som simuleringerne kører på. Forskellen i computerstørrelse varierer fra JD, som bruger en PC'er, over EP, TB og MHJ, som simulerer på computere af forskellig størrelse, gående fra workstations til supercomputere (CM 200), til OHN, ST, BL og ÅN, der hovedsageligt simulerer på supercomputere.

Simulering bruges ofte til at visualisere en model. Ud fra simuleringen kan man f.eks. tegne nogle grafer for, hvordan modellen vil opføre sig i et givet parameter-interval, men man kan også observere en models dynamik, ved f.eks. at følge hvordan bobler af varmt vand stiger op i en gryde vand, der varmes op, som beskrevet i referat af interview med TB og MJH i appendix A. Ved at følge systemets udvikling kan man få en intuitiv forståelse af komplekse systemer – en forståelse, der ellers ville være svær at opnå ved at se på slutresultatet af simuleringen (MHJ & TB).

Formål med simuleringer.

Vi fik flere bud på, hvad formålet med simuleringer er, hvilket hænger tæt sammen med, hvorfor det er smart at simulere.

Ifølge EP er styrken ved simulering, at man kan opstille sit eget modelsystem, og derved undersøge sammenhænge, som ikke lader sig undersøge ved eksperimenter. I en simulering kan man barbere "unødvendige" parametre væk, og derved isolere de størrelser, som er essentielle for det fænomen, man undersøger. Princippet i Ochams rasekniv kan indføres i videnskaben vha. simuleringer. Et eksempel på denne arbejdsmetode er givet i appendiks A under referat af interview med EP.

TB og MHJ prøver at forstå ikke-lineære og komplicerede fænomener, såsom forskellige former for stærk turbulens. Fremgangsmåden er at opstille simple modeller, der, når de simu-

leres, udviser samme kvalitative træk, som det fænomen, der forsøges modelleret. Be- grundelsen for at opstille simple modeller er, at hvis simuleringen udviser den rigtige opførsel, har man måske fået isoleret de fysiske vigtigste parametre i modellen, og dermed fundet den fysiske kerne i fænomenet. Endvidere er det med en simpel model praktisk muligt at regne på større systemer over længere tid.

Et formål med simulering er altså at finde de fysiske parametre i ens model, der er afgørende for den makroskopiske opførsel, og derved opnå en øget forståelse af det fænomen, som simu- leres. Dette vil igen sige, at man får en bedre forståelse af teorien bag fænomenet.

For OHN er det endelige mål med simulering at skabe en bro mellem et mikroskopisk og et makroskopisk beskrivelsesniveau. Dvs. ved at simulere modeller, byggende på en mikrosko- pisk beskrivelse af stoffet (en kvantemekanisk eller atomar beskrivelse), kan han finde makroskopiske egenskaber ved stoffer – f.eks. kobber. Han bruger altså simulering til at teste overgangene mellem de forskellige niveauer, man kan beskrive et fænomen på.

Et andet formål med simulering er således at teste sammenhængen mellem de makroskopiske fænomener, der iagttages, og ens tilhørende mikroskopiske beskrivelse.

Boye bruger, som tidligere nævnt, simulering som en slags selvundervisning til at opnå en bedre forståelse af abstrakte teoretiske begreber – dvs. til at opnå en bedre forståelse af en bagvedliggende teori.

At forstå ens teori og model bedre må siges at være et af formålene for alle de interviewede. Boye adskiller sig ved, at han kun simulerer for sin egen kyld, hvorfor hans brug af simulering må siges at være på et andet plan end teoretikernes.

Forringet forskningskvalitet som følge af computeren.

Ingen af de adspurgte føler at computeren har forringet forskningens kvalitet. Det er en udbredt opfattelse, at forskere, der bruger computeren på en skødesløs måde, ville have haft samme dårlige tankegang uden computerens indvirkning. Derudover bliver vigtige resultater tjekket af andre forskningsgrupper, således at uovervejede simuleringer ikke har nogen ind- flydelse på forskningen (TB & MHJ).

Dog er der en tendens til, at forskere undlader at oplyse de nærmere datalogiske detaljer omkring selve simuleringen, når de udgiver artikler. Det bliver dermed svært at efterprøve simuleringerne (EP).

Problemer ved simulering.

JD nævnte, at han ofte tøver med at gå i gang med programmeringen, fordi han ikke er meget for at påbegynde den evindelige søgen efter fejl i programmet. ST havde haft store problemer med at implementere en model på UNI-C's parallelle computer, CM-200, og nævnte i den forbindelse, at det er uheldigt, at man som forsker bliver tvunget til at bruge tid på rent datalogiske problemer. En løsning på dette kunne være at etablere et samarbejde mellem programmører og forskere. En af OHN's opgaver, som videnskabelig konsulent for CM-200's brugere, er netop at vejlede andre forskere i, hvordan de mest effektivt kan få deres model til at køre. Selvom OHN ikke er uddannet programmør, må dette ses som en anerkendelse af, at der, for at supercomputere kan udnyttes mest effektivt, er behov for specielt uddannet

personale.

Det er altså et problem, hvis forskeren skal bruge for meget tid på programmeringsfasen.

Historisk udvikling.

Med hensyn til den historiske udvikling indenfor simulering nævnte ST, at simulering oprindeligt ikke var særlig accepteret, og blev betragtet som værende useriøst. Simulering blev dog mere og mere accepteret, eftersom metoderne udvikledes og resultaterne begyndte at vise sig.

EP nævnte, at man i starten hovedsageligt brugte computere til numerisk løsning af ikke-dynamiske matematiske modeller (som falder udenfor vores definition af simulering), og det var først senere, at simulering vandt indpas.

De første simuleringers formål var, ifølge EP, at afprøve sammenhængen mellem den mikroskopiske og den makroskopiske beskrivelse af et system. Ved at simulere et system bestående af nogle partikler (atomer, molekyler eller lignende), som vekselvirker i overensstemmelse med ens mikroskopiske antagelser, opnår man resultater, der kan sammenlignes med makroskopiske observationer. Derved får man en metode til at afprøve rigtigheden af en model.

BL fremhævede, at det er forskningens mangel på computerkraft, der har drevet udviklingen indenfor supercomputere frem i det eksponentielle tempo, som vi har oplevet. På det seneste er det f.eks. gitterfeltteoriens behov for enorme regnekrafter, der har drevet udviklingen i USA.

Indvirkning på fysikkens genstandsområder.

Ingen af de interviewede gav udtryk for, at de havde kendskab til områder indenfor fysikken, der var bukket under pga. indførelse af simulering i andre felter.

Derimod har de fleste områder indenfor fysikken haft stort udbytte af brugen af simulering. BL mener, at computere er blevet et nyt grundlag for fysikken, som bla. er udvidet med det nye felt, komplekse systemer.

Simulering har haft stor indflydelse på de fleste grene indenfor naturvidenskaben, og den har betydet, at forskerne har fået et fælles sprog på tværs af fagskellene, som er med til at bryde faggrænserne ned. Med det fælles sprog menes, at måden hvorpå man implementerer sin model for at simulere den, overordnet er den samme, hvad enten det er et fysisk, kemisk eller biologisk problem. F.eks. vil forskere fra forskellige fagområder, som alle laver Monte Carlo-simuleringer, nemmere kunne kommunikere resultaterne af simuleringerne til hinanden, fordi de alle er fortrolige med den grundlæggende simuleringsmetode.

Simulering har medført, at fysikken har fået en øget rolle indenfor f.eks. kemi, idet vekselvirkningerne mellem atomer og molekyler, som ofte er det, der simuleres, bliver forklaret af fysikken. Fysikken har altså bredt sig og blandet sig med andre fagområder, hvormed det også er blevet mere uklart, hvor grænserne mellem fysik og andre områder ligger (BL).

Fremtiden.

I dag tilstræber man, af hensyn til overskueligheden og omfanget af beregningerne, at simulere simple modeller. I fremtiden vil den øgede computerkraft og de teoretiske landvindinger betyde, at man kan simulere mere komplekse modeller. Flere af de interviewede fremhævede fysisk biologi som et felt, hvor der vil ske meget i fremtiden. De forudsagde, at der indenfor dette felt f.eks. vil komme meget store simuleringer af komplicerede biologiske molekyler – såsom DNA.

Mulighederne for at lave større simuleringer vil i fremtiden betyde, at man ved at simulere store og komplekse systemer kan udregne helt specifikke værdier og former, som kan anvendes indenfor industrien og til forskning i de enkelte stoffer. På den måde vil simulering kunne anvendes indenfor endnu flere områder.

Idet parallelle computere er relativt billigere end de traditionelle, vil det blive rentabelt at lave mange halvstore decentralt placerede anlæg – med det formål at lette adgangen for forskerne til kraftige computere.

Af områder, der har brug for meget regnekraft, kan nævnes meteorologi, hydrodynamik, QCD samt især fysisk kemi – dvs. studier af molekylestrukturer, DNA mm. (EP & BL).

Hvorfor store computere?

Fremtiden vil, som tidligere nævnt, bringe hurtigere computere, hvilket vil øge anvendelsen af simulering. En begrundelse for dette er, at man med hurtigere computere kan simulere systemer indeholdende virkeligt mange partikler. Da det antages, at man nærmer sig den termodynamiske grænse asymptotisk ved en forøgelse af antallet af simulerede partikler, vil man således komme tættere på denne grænse. Dette betyder, at de makroskopiske resultater fra simulering efterhånden bliver sammenlignelige med de makroskopiske størrelser, som måles i laboratoriet, hvilket forhåbentligt vil føre til en øget viden om det simulerede materials egenskaber (OHN).

Spørgeskema undersøgelser.

Den ældste spørgeskemaundersøgelse blev foretaget i 1965 af Robert J. Spinrad, der på den tid var leder af "Computer Systems Group" på Brookhaven National Laboratory, New York, USA.

R.J. Spinrad lavede undersøgelsen, fordi han havde en fornemmelse af, at forskerne på stedet var uenige om "det nye værktøjs" anvendelighed; han ville derfor bla. undersøge, om skellet i meninger lå mellem forskellige aldersklasser eller mellem forskellige forskningsområder. Spørgeskemaet blev sendt ud til de over 400 forskere, der arbejdede på stedet.

Derudover bruger vi en nutidig undersøgelse fra 1991, lavet af Edb-kapacitetsudvalget, Statens Naturvidenskabelige Forskningsråd, Statens Teknisk-Videnskabelige Forskningsråd samt UNI•C. Dens formål var at kortlægge forskernes behov for computerkapacitet. Spørgeskemaet blev udsendt til 100 forskergrupper, der potentielt kunne tænkes at få behov for super-computere indenfor den næste 4-års periode. 70 grupper svarede, hvoraf de 40 havde erfaring med brug af vektorprocessorer. Vi vil forsøge at sammenligne undersøgelserne, hvor det er

muligt, hvilket dog er vanskeligt, da de har vidt forskellige formål.

Ud over de to undersøgelser har vi læst rapporten: "Proposal for a European Teraflops Initiative" (ETI) fra 1991, der er lavet for The Steering and Technical Options Committees of the ETI, under EF. ETI har 3 formål:

- At Europa opnår og opretholder konkurrencedygtighed indenfor strategiske problemer indenfor teknologi og videnskab.
- At stimulere den europæiske supercomputer-industri.
- At sikre at den næste generation af europæiske forskere er trænet i at bruge de største computere.

En del af rapporten forsøger at konkludere på, indenfor hvilke områder der bliver brug for supercomputere, og hvor kraftige de skal være.

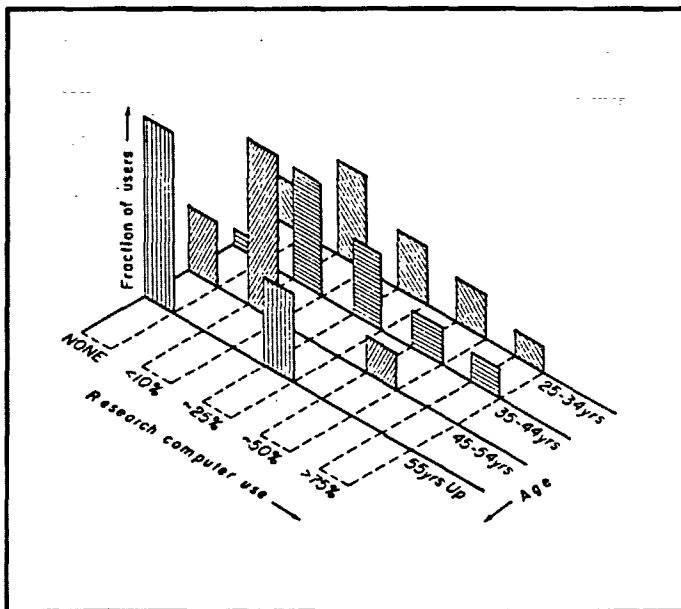
Undersøgelse fra '65.

Spørgeskemaet til denne undersøgelse er at finde i appendix B.

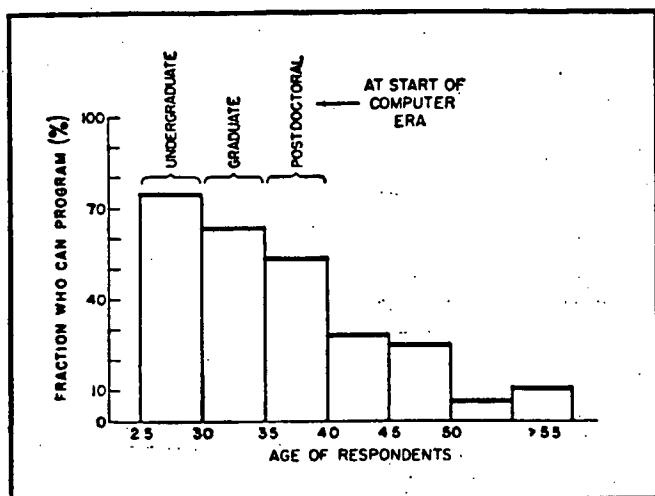
Undersøgelsen viser tydeligt, at det hovedsageligt er de unge forskere, der benytter computeren, hvilket ses af fig. 3.1. Det antydes i undersøgelsen, at årsagen formodentlig er, at de, gennem deres videnskabelige karriere, er vokset op med computeren, og derfor har haft mulighed for at lære at arbejde med den fra begyndelsen. Ifølge fig. 3.2 er der procentvis langt flere unge forskere, der er i stand til at programmere, hvilket må have samme årsag.

Der var en tendens til, at computeren blev brugt mere indenfor fysik end indenfor andre fagområder (biologi og medicin).

Der var delte meninger blandt de adspurgte på spørgsmålet om, hvorvidt computeren ville få folk til at "tænke sjusket". Et argument for at de ville, var faren for, at der ville fremkomme programmer, der var udformet af flere forskellige personer over lange perioder – som ingen derfor kendte til bunds. Dette ville naturligvis medføre, at man blev nødt til at stole på resultater, hvis fremkomst man ikke kunne gennemskue. Et argument for det modsatte var, at de forskere, der tænkte sjusket med en computer, nok ville gøre det under alle omstændigheder. En biofysiker mente endog, at computeren hjalp ham til at organisere sine problemer bedre. Det viste sig, at der var en netto-bevægelse mod computerprægede fagområder, idet 48% mente, at deres forskning bevægede sig mod sådanne områder. Kun 3% mente, at deres forskning bevægede sig den anden vej, mens resten mente, at computeren overhovedet ikke havde indflydelse på,



Figur 3.1. Den del af fysikerne, der brugte computere, er afbildet som funktion af alder og den tid, der blev brugt foran computeren [1].



Figur 3.2. Der er procentvis flere unge end ældre forskere, der kan programmere [2].

hvad de interesserede sig for.

Ligeledes ses det af rapporten, at blandt atomfysikere, der var den gruppe forskere blandt de adspurgte, der afsatte mest forskningstid på computere, var der hele 75%, der regnede med at udbredelsen af computere indenfor forskningen, ville gå endnu hurtigere. Dette skal ses i modsætning til biologerne, hvor der kun var 23%, der forventede en hurtigere udbredelse. Der var således en tendens til, at forskere, der var vant til at bruge computere, bedst kunne se de nye muligheder, som de tilførte forskningen.

Undersøgelsen prøvede at skabe et billede af, hvor meget fremtidige forskerne ville komme til at bruge computere, ved at spørge forskerne om de var af den mening, at deres studerende skulle lære at programmere. Over 90% mente, at alle eller en del af deres studerende burde lære at programmere; det var altså et generelt indtryk, at brugen af computere ville blive øget. I undersøgelsen var også udtalelser, der pegede imod, at man burde udvide samarbejdet med professionelle programmører i stedet for, at forskerne selv skulle bruge deres kostbare tid på datalogiske overvejelser.

Undersøgelser fra '91.

Den danske undersøgelse viser at forskningsgrupper, der i forvejen bruger kraftige computere, regner med at få behov for endnu kraftigere indenfor en overskuelig årrække. Dette må ses som en parallel til resultatet fra undersøgelsen fra 65, hvor de mest computer-brugende grupper forventede den største vækst i brugen af computere, således at dem, der allerede benytter computere i deres arbejde, ønsker at bruge dem mere.

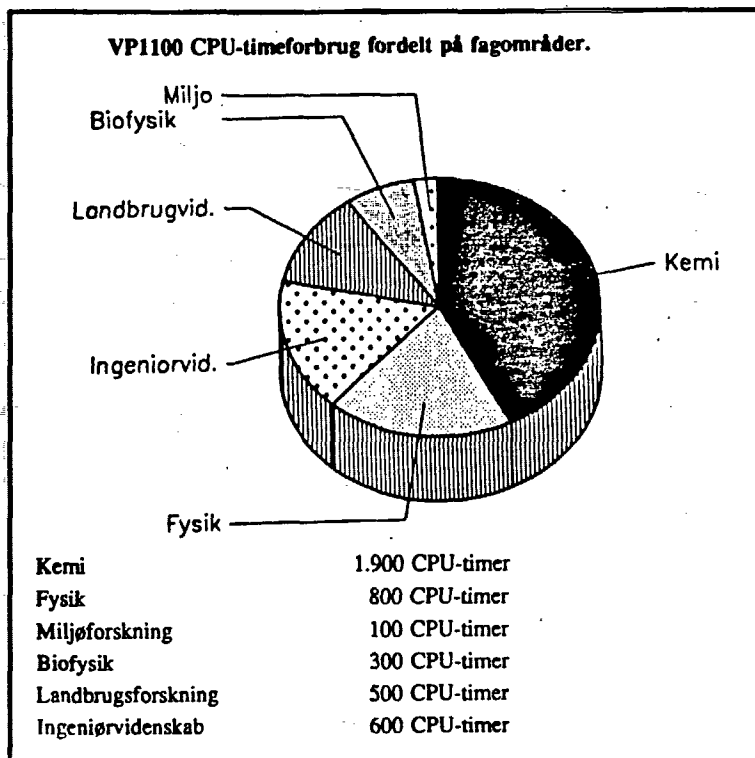
I rapporten giver et par forskningsgrupper udtryk for, at det er lige så vigtigt at have kompetente folk, der er ansvarlige for de eksisterende supercomputere, som det er at anskaffe større computere. Grupperne mener, at de eksisterende computere så vil kunne blive udnyttet bedre, så behovet for større maskiner mindskes.

Nogle grupper mener, at det vil være en fordel, hvis der er mange halvstore supercomputere, i stedet for få store. Selvom de benyttede maskiner herved er lidt langsommere, er antallet af forskere pr. maskine mindre, hvorfor den enkelte forsker kan få beregningstid, lige når der er brug for det. Stort set alle forskningsgrupper giver iøvrigt udtryk for, at en evt. kommende supercomputer skal køre under styresystemet UNIX.

Rapporten viser at de områder, hvor man bruger flest cpu-timer på kraftige computere, er indenfor kemi (her generaliserer vi ud fra brugen af VP1100, UNI●C's vektorcomputer, se fig. 3.3).

I ETI-rapporten viser det sig at de områder, hvor man har brug for store computere, bla. koncentrerer sig om forskning af materiale-egenskaber (strukturer), som ligger på grænsen mellem

kemi og fysik (halvleder industrien). Et eksempel på et underområde, som man mener vil få nytte af en europæisk TeraFlop-maskine er: "Quantum Monte Carlo Studies of High T_c Models" (Monte Carlo-simulering af en kvantemekanisk model af højtemperatur-superledere). Begrundelsen for at foretage en sådan simulering er, at resultatet kunne virke vejledende for den eksperimentelle søgen efter superledere, der for øjeblikket stort set foregår efter "trial and error"-princippet. Dermed ville omkostningerne til fremstilling og testning af nye superledende materialer kunne reduceres. For at få brugbare resultater skal man have ca. 1 TeraFlopDay til rådighed.



Figur 3.3. VP1100 CPU-timedforbrug fordelt på fagområder. [2]

Et andet område, hvor man kan få brug for meget kraftige computere, er "Lattice Simulations of QCD and the Electroweak Interactions". Indenfor dette område er simuleringer meget vigtige, da der ikke findes måleapparatur, hvormed man kan undersøge quarker, gluoner eller "glueballs" eksperimentelt. Al forskning indenfor dette område foregår derfor på computere. Med en TeraFlop-computer regner man med at blive i stand til at finde massen af f.eks. "glueballs".

Medmindre de simuleringer, der foretages indenfor kemi på VP1100, har forbindelse til fysisk kemi, er der tilsyneladende delte meninger om, hvem der simulerer mest på supercomputere i de to nye rapporter.

Opsummering.

Interviews.

Fysikere, der computersimulerer, gør det i perioder. Grunden til det er, at der forud for en simuleringsperiode ligger et teoretisk arbejde. Når en simulerings-aktiv periode er ophørt, følger ofte en periode, hvor nye projekter, som evt. indebærer nye simuleringer, forberedes. Indenfor ét projekt kan der også forekomme pauser i simuleringsforløbet, hvor de foreløbige resultater overvejes og nye ideer udvikles.

Det er vores indtryk, at teoretikere oftere bruger simulering end eksperimentalfysikere. Dette begrundes vi med, at de fysikere vi blev henvist til, alle viste sig at være teoretikere. At der er denne skævhed skyldes formodentligt, at simulering i høj grad knytter sig til udvikling og

vurdering af modeller, hvilket fortrinsvis foretages af teoretikere.

Efter interviewet med Boye har han fortalt, at der er en gruppe i USA, der arbejder indenfor samme område som ham selv, som tydeligvis også har lavet en form for selvundervisende simuleringer, uden dog at have beskrevet det i deres artikler. Dette kunne tyde på, at eksperimentalfysikere anvender simulering til selvundervisning, i det omfang de i det hele taget anvender det.

Som fysiker vil man oftest have en klar hensigt med sin simulering, hvorfor simuleringen fra starten går ud på at bekræfte nogle antagelser. Da resultatet af simuleringen meget ofte er lidt anderledes end det forventede, kommer arbejdet med simuleringen hurtigt til at indeholde både idéudviklende og bekræftende elementer.

Afgørende for, om en simulering virker idéudviklende, er, at modellens opførsel kan visualiseres på skærmen. Dette kan give nogle informationer om modellen, som er meget svære eller umulige at få ud fra den matematiske formulering. F.eks. kan man ved at studere et systems søgen mod ligevægt, få nogle ideer om hvordan den bagvedliggende dynamik virker.

Det idéudviklende arbejde med simuleringen trives bedst ved PC'ere eller workstations. Supercomputerfolkene kan ikke arbejde på helt samme måde, da de typisk får tildelt et vist antal regnetimer indenfor et begrænset tidsrum.

Formålet med simulering er i nogle tilfælde at se, hvilken makroskopiske effekter ens mikroskopiske beskrivelse medfører. Andre gange bruges simulering til at få en forståelse af et makroskopisk fænomen - f.eks. turbulens. Endelig kan simulering bruges til selvundervisning. De forskellige formål afspejler, at simulering bruges forskelligt.

Med hensyn til ændringer i genstandsområder har simulering medført, at forskere fra forskellige fagområder har fået et fælles grundlag, de kan mødes over. Dermed er faggrænserne blevet mere utydelige, og fysikkens måde at betragte verden på har bredt sig ind over andre fagområder.

Undersøgelser.

En af årsagerne til, at computerne havde sværere ved at slå igennem blandt ældre forskere er, at de skulle ændre adfærdsmønstre for at få glæde af computeren, hvorimod unge forskere ikke på forhånd havde nogen forskningsmæssig adfærd.

Vi mener at tendensen til, at computerne i starten af deres fremkomst blev brugt mere indenfor fysik end andre fagområder, skyldes, at fysiske problemer nemmere kan formuleres matematisk end problemer indenfor andre fag, og dermed var oplagte for løsning med computere. Af betydning har også været, at det var fysikere, der var med til at udvikle computerne, og at de har en lang tradition for anvendelse af tekniske hjælpemidler.

Formålet med simulering er dels at verificere teorier og finde interessante egenskaber ved forskellige systemer, men også at fungere i det forberedende arbejde i forbindelse med eksperimentelt arbejde. I ETI-rapporten foreslås det f.eks., at man laver simuleringer af højtemperatur-superledere for at få nogle ideer om hvilke stoffer, der kan blive superledende.

På denne måde kan den eksperimentelle forskning indenfor superleder-feltet blive mere målrettet - i modsætning til den "trial and error" metode man bruger i dag.

Sammenligning af undersøgelser og interview.

I undersøgelsen fra '65 blev forskerne spurgt, om computeren kunne bevirke, at man tænkte sig mindre grundigt om. Dette mente flertallet af de adspurgte ikke var tilfældet, hvilket er det samme svar vi fik fra de interviewede. Faktisk virker simulering lige modsat, idet resultaterne ofte giver forskerne konstruktive ideer til den videre teoriudvikling. Eller som JD beskrev arbejdet med simulering, når programmeringsfasen var overstået: "Det er ligesom at tale med en der har forstand på det".

Et mere reelt problem ved simulering var, at rent datalogiske problemer kunne optage for meget af forskerens tid. Ud fra udtalelser i den tidligere undersøgelse om at forskerne burde lære at samarbejde mere med professionelle programmører, mener vi at kunne konkludere, at forskerne før havde behov for professionel hjælp med programmeringen. Samarbejdet med programmører er ifølge vores opfattelse ikke i særlig høj grad blevet ført ud i livet. Udtalelser i UNI●C-rapporten om, at det er en fordel med kompetente folk, som ansvarlige for super-computerne, tyder på, at forskerne stadigvæk er interesserede i et samarbejde med folk, der har særlig stor viden om bestemte computere. Det er dog ikke helt de samme behov, der tales om i de to tilfælde, da man i dag er interesseret i selv at være med i selve programmeringsprocessen.

Med hensyn til hvilke områder, der vil optage meget computertid i fremtiden, er rapporterne og interviewene ikke helt samstemmende. Et emne, der bliver nævnt af flere af de interviewede, er organiske molekylestrukturer - såsom DNA, hvorimod ETI-rapporten godt nok nævner biologisk rettede molekyleundersøgelser, men det er hovedsageligt faststof- og partikel- fysiske problemer, der er de store computertids-slugere.

Kildefortegnelse

- 1) Robert J. Spinrad: "The Computer and You", Physics today, december 1965.
- 2) Undervisnings- og forskningsministeriets Edb-kapacitetsudvalg: "Spørgeskemarapport fra SUS-udvalget", december 1991.
- 3) The Steering and Technical Options Committees of the ETI: "Proposal for a European Initiative", 1991.

Kapitel 4.

Egne simuleringer.

I dette afsnit beskriver vi vores personlige erfaringer med simuleringer. Vi har lavet to simuleringer: En simulering af den 2 dimensionelle Ising model og en simulering af ledningsevnen i uordnede stoffer. I begge tilfælde drejer det sig om Monte Carlo simuleringer.

Da vi begyndte at beskæftige os med simulering i fysikken, valgte vi at koncentrere os om statistisk mekanik. Indenfor dette område findes to grundlæggende forskellige metoder: Monte Carlo (MC) og Molecular Dynamics (MD), som er henholdsvis stokastisk og deterministisk. Da vi besluttede os for selv at udføre en simulering, var det derfor naturligt, at vælge mellem MC og MD. Vi fandt umiddelbart, at ideen i MC var den mest interessante af de to, og da vi samtidig fik anbefalet, at lave en MC-simulering af Ising modellen blev det denne, vi gik i gang med.

Simuleringen af Ising modellen er velkendt og gennemafprøvet, og modellen er løst analytisk i 2 dimensioner af Lars Onsager. Altså var der ikke noget nyt at forvente fra denne simulering, men den gav os kendskab til de grundlæggende idéer og begreber ved Monte Carlo simulering. Dette har udgjort en faglig baggrund for arbejdet med historieafsnittet og interviewene. En redegørelse for Ising modellen og resultaterne af simuleringen findes i appendix C.

Efter arbejdet med MC overvejede vi at lave en MD-simulering, således at vi havde prøvet begge metoder. På dette tidspunkt var vi igang med at interviewe forskellige fysikere om deres brug af simulering. I denne forbindelse fortalte Jeppe Dyre, at han havde flere simuleringsopgaver liggende, som kunne være interessante i forbindelse med hans forskning (Se appendix A "Referat af interview med Jeppe Dyre"). Vi mente, at det ville være meget udbytterigt for os, at påtage os en af disse opgaver, da det kunne give os et førstehåndskendskab til fysikernes arbejde med simulering. Dette førstehåndskendskab regnede vi med at opnå, dels ved selv at skulle udføre en simulering der ikke var lavet før, og dels gennem det mere konkrete samarbejde med Jeppe Dyre.

Valget af simuleringsopgave faldt på simuleringen af ledningsevnen af uordnede stoffer. Grundende til dette valg var flere:

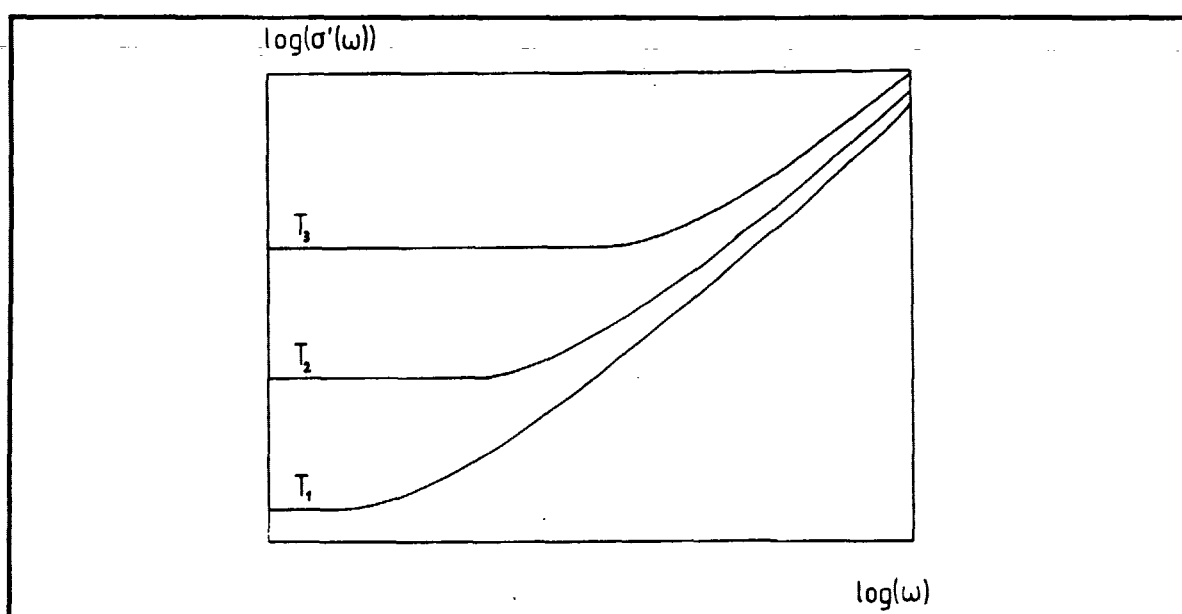
- Der lå en "færdig" model, og en approksimativ løsning som stemte overens med de forholdsvis entydige eksperimentelle resultater; det var oplagt at forsøge at lave en bekræftende simulering.
- Jeppe havde tidligere lavet en simulering af modellen i 1 dimension, som gav de "rigtige" resultater. Denne simulering kunne ikke umiddelbart overføres til 2 og 3 dimensioner (som er det rigtigt interessante) grundet manglende regnekraft; opgaven var altså ikke triviell.
- Vi havde allerede fra start nogle idéer til, hvordan simuleringsmetoden kunne forbedres; det var ikke urealistisk, at vi kunne løse opgaven.
- Der var en bestemt antagelse i modellen, som det ville være interessant at prøve at

ændre (mere derom senere); der var mulighed for i sidste ende at anvende simuleringen idéudviklende.

Resten af dette kapitel handler om vores erfaringer med simuleringen af ledningsevnen i uordnede stoffer. Vi starter med en status over situationen, som den så ud, før vi begyndte på simuleringen. Derefter beskrives modellen og den fysik, der ligger bag. Efter dette beskriver vi overordnet, hvordan vi er gået frem med simuleringen, efterfulgt af en redegørelse for de opnåede resultater. Sidst, men ikke mindst, samler vi op på vores erfaringer med simuleringen.

Eksperimentelle resultater.

Det har vist sig ved eksperimenter, at der er en stor gruppe stoffer for hvilke ledningsevnen afhængighed af frekvensen og temperaturen ($\sigma(\omega, T)$) kvalitativt er ens. Disse stoffer, som hører under kategorien uordnede faste stoffer, er bl.a.: Amorfe halvledere, Ion-ledende glasser, Organiske halvledere, Ion- eller elektron-ledende polymerer mm. Den kvalitative opførsel af $\sigma(\omega, T)$ er illustreret på følgende graf:



Figur 4.1. Grafen viser realdelen af den frekvensafhængige ledningsevne for tre temperaturer $T_1 < T_2 < T_3$ [1].

Ud fra grafen ses følgende karakteristiske træk ved $\sigma(\omega, T)$:

- 1) Der er en approksimativ potenslov for store frekvenser ($\text{Re } \sigma(\omega) = k \cdot \omega^f$).
- 2) Under den karakteristiske frekvens ω_m er ledningsevnen uafhængig af frekvensen og lig ledningsevnen ved jævnspænding ($\sigma(0)$). I det efterfølgende betyder $\sigma(\omega)$ ledningsevnen for $\omega > \omega_m$.
- 3) $\sigma(0)$ er væsentlig mere temperaturafhængig end $\sigma(\omega)$.

Endvidere har man eksperimentielt fundet følgende generelle træk ved $\sigma(w,T)$:

- 4) w_m er proportional med $\sigma(0)$.
- 5) Størrelsen af potensen s vil typisk ligge i intervallet 0,5–1,0, og går mod 1 for T gående mod nul.
- 6) $\sigma(w)$ bliver temperaturuafhængig for T gående mod nul.

Det er værd at bemærke, at de ovennævnte stoffer leder strøm ved to forskellige mekanismer, som man ikke tidligere mente havde noget med hinanden at gøre. De to mekanismer er ionledning, som er en termisk aktiveret mekanisme, og elektronledning som er en kvantemekanisk effekt.

Vi har altså en situation, hvor vi har to forskellige mekanismer, men hvor de eksperimentelle resultater tyder på, at mekanismerne kan beskrives vha. samme model.

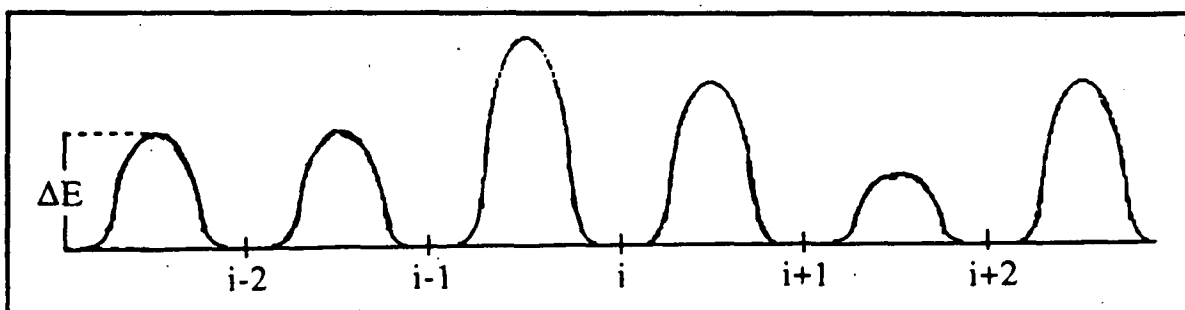
Teoretisk arbejde.

Der er gjort bestræbelser på at opstille modeller, der fremviser samme kvalitative træk, som er fundet ved eksperimenter. Jeppe Dyre har videreudviklet en model opstillet af Stevel og Taylor [2], og derved nået frem til en model, som han selv mener er den simplest mulige realistiske. Denne har han løst approksimativt i 1, 2 og 3 dimensioner, og løsningen forudsiger korrekt de kvalitative træk ved vekselstrømsledning i uordnede faste stoffer. For at undersøge holdbarheden af approksimationerne har han lavet en bekræftende simulering af modellen i 1 dimension, mens simuleringen i 2 og 3 dimensioner endnu ikke er blevet foretaget, da de er meget beregningskrævende.

Modellen.

Vi vil i dette afsnit beskrive modellen for den frekvensafhængige ledningsevne i uordnede stoffer. Det er nemmest at beskrive og simulere modellen i 1 dimension. Ud fra dette er det rimeligt nemt at generalisere modellen og den tilhørende simulering til 3 dimensioner.

Modellen er en såkaldt Hopmodel, hvilket vil sige, at man forestiller sig en ladbingsbærer (ion eller elektron), der hopper rundt i et gitter (se fig 4.2).



Figur 4.2. 1-dimensionelt uordnet gitter.

Gitteret består af et antal pladser, hvor ladbingsbæreren kan befinde sig. Disse svarer til energiminima i det uordnede stof. I mellem disse minima findes der nogle energibarrierer, som

ladningsbæreren skal hoppe over for at komme til en naboplads. Netop fordi stoffet er uordnet er størrelsen af energibarriererne tilfældigt fordelt. Man har ikke nogen klar viden om fordelingen af energibarriererne. Jeppe Dyre har i sin approksimative løsning af modellen gjort den simpelst mulige antagelse, nemlig at størrelsen af energibarriererne er ligeligt fordelt.

I modellen regnes afstandene mellem de enkelte minima for at være en konstant, a . Dette stemmer ikke helt overens med de virkelige forhold, idet disse afstande typisk varierer med en faktor 2 til 3. Dette regnes dog ikke for at have stor indflydelse på ledningsevnenes frekvensafhængighed, idet størrelsen af hopsandsynligheden varierer over mange dekader.

Hopsandsynligheden.

Ladningsbæreren har en vis sandsynlighed (pr. tidsenhed) for at hoppe til venstre eller til højre. Denne sandsynlighed afhænger af størrelsen på den energibarriere (ΔE), den skal over, og er givet ved:

$$p(\Delta E) = p_0 e^{-\Delta E/k_B T} \quad (4.1)$$

p_0 er hoforsøg pr. tidsenhed pr. retning ladningsbæreren kan hoppe.

k_B er Boltzmanns konstant.

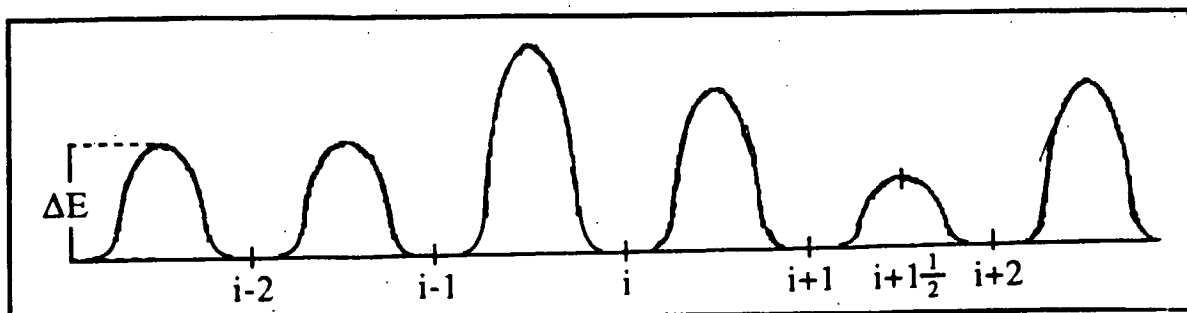
T er temperaturen.

Hopsandsynligheden kan begrundes ud fra følgende argumenter:

Vi betragter modellen, som en model for den termisk aktiverede ionledning. Det vil sige, at ladningsbæreren hopforsøg egentlig er termiske fluktuationer, så "højden" af hoppene må være Boltzmannfordelt, hvilket udtrykkes i ligning 4.1.

Ligning 4.1 kan også begrundes, hvis man trækker en analogi til Ising-modellen. For at gøre dette definerer vi en mikrotilstand x_i ved, at ladningsbæreren befinder sig på den i 'te gitterplads. Vi definerer nu yderligere mikrotilstanden $x_{i+1/2}$ ved, at ladningsbæreren befinder sig på toppen af energibarrieren mellem x_i og x_{i+1} (se figur 4.3). Systemets energi i mikrotilstanden $x_{i+1/2}$ sættes lig energibarrierens højde, og i x_i sættes den lig 0. Systemets dynamik kan nu beskrives ved, at ladningsbæreren for at komme fra x_i til x_{i+1} skal igennem mikrotilstanden $x_{i+1/2}$. Hermed kan hopsandsynligheden fortolkes som værende en overgangssandsynlighed fra x_i til $x_{i+1/2}$ og dermed også en overgangssandsynlighed fra x_i til x_{i+1} , idet vi antager at ladningsbæreren, altid hopper videre fra $x_{i+1/2}$ til x_{i+1} . Da vi modellerer et system i termisk ligevægt, må mikrotilstandene være Boltzmann fordelt efter deres energi. Dette sikredes i Ising modellen ved Metropolis-algoritmen (se appendix C), som angav en overgangssandsynlighed der for $\Delta E > 0$, svarer til ligning 4.1.

Ud fra analogien ses det, at i et ensemble af systemer, er sandsynligheden for at finde ladningsbæreren på en bestemt gitterplads ens for alle gitterpladser, da disse har samme energi.



Figur 4.3. 1-dimensionalt uordnet gitter med mikrotilstanden $i+1\frac{1}{2}$.

Som tidsenheden i modellen er det praktisk at anvende den såkaldte attacktid for systemet, dvs. en tid der angiver, hvor ofte ladningsbæreren i gennemsnit forsøger at hoppe. Idet sandsynligheden pr. tidsenhed for at ladningsbæreren hopper i en given retning, så bliver givet ved ligning 4.2:

$$P_0 = \frac{1}{2 \cdot DIM} \quad (4.2)$$

...hvor DIM er antallet af dimensioner. Dette udtrykker, at ladningsbæreren kan forsøge at hoppe i $2 \cdot DIM$ forskellige retninger, og at de alle er lige sandsynlige.

For de stoffer vi modellerer er attacktiden af størrelsesordenen 10^{-12} s.

Tiden i modellen er kontinuert, men det er fristende at opfatte den som værende diskretiseret med et tidsskridt lig attacktiden, som vi selv gjorde i starten. Dette er en for snæver opfattelse af modellen, idet attacktiden, som nævnt, kun angiver en gennemsnitstid mellem hvert hopforsøg, hvilket ikke udelukker, at ladningsbæreren kan prøve at hoppe, hvornår det skal være.

Beregningen af ledningsevnen ud fra modellen.

Ovenstående er altså en model for den frekvensafhængige ledningsevne i uordnede stoffer. Dette kan i første omgang virke lidt underligt; der indgår jo ikke noget ydre felt i modellen! Forklaringen er, at $\sigma(\omega)$ kan beregnes ud fra de strøm-fluktuationer, der er i stoffet ved ligevægt (altså uden påtrykt spænding), idet det såkaldte Fluktuations- Dissipations teorem (FD-teorem) angiver en sammenhæng mellem disse størrelser (se appendix D). Ud fra den lineære responsteori og specielt FD-teoremet kan det endvidere vises, at den frekvensafhængige ledningsevne er givet ved den såkaldte Kubo-formel (se appendix D):

$$\sigma(\omega) = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{q^2}{2L^2 kT t'} \left(\left[\sum_j \Delta r_j \cos(\omega \tau_j) \right]^2 + \left[\sum_j \Delta r_j \sin(\omega \tau_j) \right]^2 \right)$$

τ_j er det tidspunkt hvor det j 'te hop foretages.

Δr_j er den afstand der hoppes ($-a$ eller $+a$), ved det j 'te hop.

T er temperaturen, q er ladningen pr. ladningsbærer.

t' angiver det tidsinterval, indenfor hvilket hoppene bidrager til udtrykket ($0 < \tau_j < t'$). I virkeligheden er t' nærmest uendelig p.g.a. den meget lille attacktid, men når simuleringen

foretages må t' sættes til en endelig værdi. Denne værdi skal være stor, således at fejlen ved at bruge et endeligt t' bliver lille.

Ledningsevns frekvensafhængighed.

Ledningsevns frekvensafhængighed kan ud fra vores model forklares på følgende måde:

I det ledende stof vil der være områder af vekslende størrelse (clusters), hvor energibarriererne er forholdsvis små. Altså kommer ladningsbærerne forholdsvis ofte over barriererne i disse områder, og bidrager dermed meget til ledningsevnen. Jo højere frekvensen af det ydre felt er, jo mindre afstand vil ladningsbærerne nå at tilbagelægge, før feltet skifter. Derfor stiger ledningsevnen med frekvensen, idet mindre og mindre clusters med små energibarrierer vil kunne udnyttes af ladningsbærerne. Med "udnyttes" menes, at feltet skifter så hurtigt, at ladningsbærerne ikke når, at komme udenfor clusterne inden feltet skifter, hvorfor de konstant befinder sig i et område hvor ledningsevnen er forholdsvis høj. $\sigma(\omega)$ afhænger af dannelsen af "stier" mellem elektroderne, som så vidt muligt undgår områder med for store energibarrierer. Forekomsten af den karakteristisk frekvens ω_m skyldes, at man forestiller sig en endelig maksimal clustersstørrelse. Når frekvensen er så lav, at selv de største clusters ikke udnyttes, bliver ledningsevnen stort set ikke ringere af en yderligere nedsættelse af frekvensen.

Ovenstående forklaring giver et billede af, hvorfor modellen forventes at give den observerede kvalitative opførsel af $\sigma(\omega)$. En lidt mere konkret forklaring fås ved at se på korrelationen af de enkelte hop: I en hopmodel, hvor sandsynligheden for hop til venstre p_v er lig sandsynligheden for hop til højre p_H for alle gitterpunkter, er hoppene ukorrelerede. Dette betyder, at retningen af hoppene ikke er afhængige af det foregående hop. I vores model er hoppene korrelerede, idet ladningsbærerne har en tendens til at hoppe tilbage, hvor de kom fra. Dette skyldes at ladningsbærerne i gennemsnit oftest vil hoppe over en lille energibarriere. Når dette sker, vil sandsynligheden, for at de hopper tilbage, være større end sandsynligheden for, at de hopper fremad, da energibarrieren, som netop er passeret, i gennemsnit vil være lille i forhold til den næste.

Korrelationen giver altså en konservativ effekt, som er med til at hæmme ledningsevnen. Denne effekt er afhængig af frekvensen, idet jo større frekvensen er, jo mindre betyder korrelationen. For $\sigma(\infty)$ er korrelationen uden betydning, idet ladningsbæreren højst når at hoppe en gang, før feltet skifter retning. Desto hyppigere feltet skifter, desto oftere vil det passe sammen, at ionen hopper tilbage, samtidig med at feltet skifter, således at korrelationen i disse tilfælde nærmere bidrager til ledningsevnen.

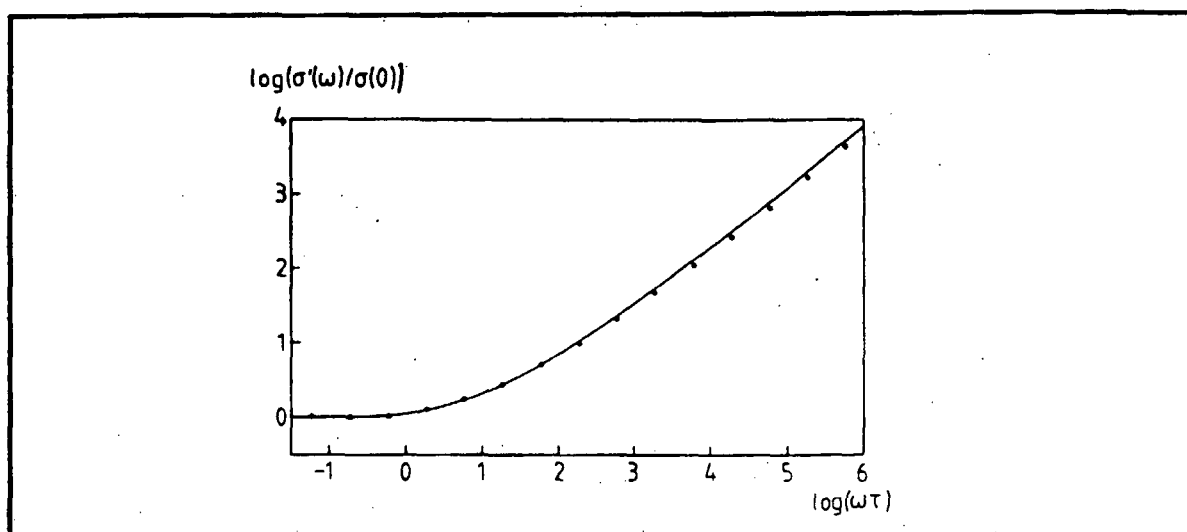
For meget høje frekvenser bliver ledningsevnen igen uafhængig af frekvensen. Dette kan forklares udfra modellen med, at der findes en maksimal hopfrekvens (hopsandsynlighed pr tidsenhed) for ladningsbæreren svarende til hop over den mindste energibarriere. Når det ydre felt skifter hurtigere end ladningsbæreren hopper, dvs. hurtigere end den maksimale hopfrekvens, "mærker" ladningsbæreren ikke, at feltet skifter så hurtigt, og det har derfor ingen effekt at sætte frekvensen yderligere op.

I eksperimenter observeres det også, at ledningsevnen ophører med at stige ved høje frekvenser, men man ser desuden et fald i ledningsevnen, når frekvensen bliver endnu højere. Endvidere optræder der i dette frekvensområde forskellige resonanseffekter, hvilket gør, at hopmodellen ikke kan regnes for en tilstrækkelig beskrivelse af forholdene i dette frekven-

sområde.

Forventet løsning.

Jepe har som nævnt lavet en approksimativ løsning af modellen, hvorved en ligning er fremkommet, som angiver sammenhængen mellem ledningsevne og frekvens. Plottes denne ligning fremkommer følgende forløb af ledningsevnen (se fig. 4.4).



Figur 4.4. Sammenligning mellem Jepe Dyr's approksimative løsning (sammenhængende graf) og en anden approksimativ løsning (punkter) [1].

Det er altså denne graf, vi skal sammenligne med vores simuleringsresultater. Det ses, at ledningsevnen ikke bliver uafhængig af frekvensen ved høje frekvenser, hvilket skyldes, at Jepe i approksimationen har elimineret denne effekt, netop pga. hopmodellen er en utilstrækkelig beskrivelse i dette frekvensområde. Altså kan vi kun sammenligne vores simuleringsresultater med figur 4.4. indtil den frekvens, hvor grafen for den fundne ledningsevne begynder at flade ud.

Algoritmer.

"Brute Force" algoritmen.

Vi vil nu beskrive den algoritme, vi som udgangspunkt anvendte til simuleringen af den beskrevne model i 1 dimension. Dette skal dels læses, som en konkretisering af modellen, og dels som en overordnet beskrivelse af hvad der sker i programmet, der er anvendt til simuleringerne.

I brute-force algoritmen arbejdes der med en diskret tid. Dette vil sige, at et tidsskridt består af et hopforsøg, hvor ladningsbæreren hopper til venstre eller til højre med de sandsynligheder, der er givet ved ligning 4.1.

En kørsel i brute-force algoritmen består af en initialisering (punkt 1) og $\max_t (=t')$ antal hopforsøg (punkt 2 til 6):

1. Placer ladningsbæreren på en tilfældig plads, r , i gitteret.

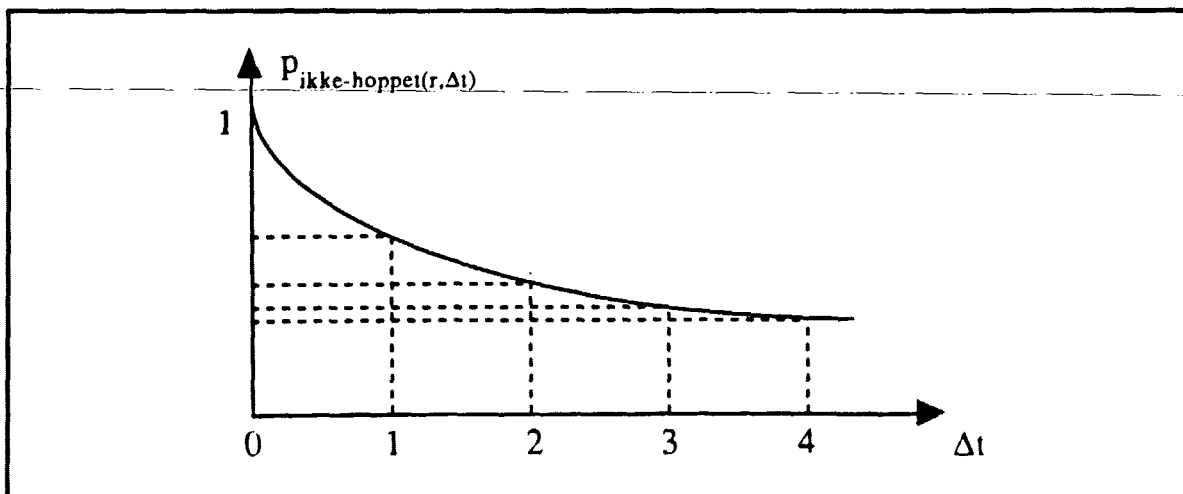
2. Tæl tiden, t , op med én (startværdi: $t=0$).
3. Træk med lige sandsynlighed et tal mellem nul og en.
4. Hvis tallet er mindre end $p_v(r)$ så sæt $\Delta r = -1$, og gå til punkt 6. (Ladningsbæreren hopper til venstre).
5. Hvis tallet er mindre end $p_{hop} = p_v(r) + p_H(r)$ så sæt $\Delta r = +1$. (Ladningsbæreren hopper til højre).
6. Hvis der er ikke er hoppet, så gå til punkt 7. Ellers:
 - Tæl antallet af hop op med én.
 - opdater r (med periodiske randbetingelser)
 - Opdater CosSum og SinSum for hver af de brugervalgte frekvenser:
 $\text{CosSum}(w) := \text{CosSum}(w) + \Delta r * \text{Cos}(w * t)$.
7. Hvis $t \leq \text{max}_t$ så gå til punkt 2.
8. Den værdi der, i denne kørsel, er fundet for ledningsevnen, er nu givet ved:
 $(\text{CosSum}(w)^2 + \text{SinSum}(w)^2) / \text{max}_t$.
 (Vi medregner ikke konstanterne i Kubo-formlen).

Ventetids algoritmen.

Brute-force algoritmen er en meget direkte implementering af modellen, hvis man opfatter modellens dynamik, som en udvidelse af den almindelige Random-Walk, hvor forskellen er, at hopsandsynlighederne i modellen ligger mellem 0 og 0,5 (faktisk vil brute-force algoritmen give en almindelig Random Walk, hvis temperaturen sættes til uendelig (se formel 4.1.). Problemet med denne algoritme er, at der for lave temperaturer (som er de interessante) ofte vil ske det, at der foretages mange hopforsøg, inden ladningsbæreren hopper. Dette betyder så, at max_t skal være meget høj, for at der bliver lavet tilstrækkeligt mange hop. Da regnetiden for programmet er proportional med max_t betyder dette, at det bliver meget langsomt for lave temperaturer.

Ideen i ventetids algoritmen bygger på, at det er givet, at ladningsbæreren hopper før eller siden. Det skal bare afgøres, hvornår dette sker. Sandsynligheden for at ladningsbæreren, der sidst hoppede til tiden t , ikke er hoppet til tiden $t + \Delta t$, er givet ved:

$P_{\text{ikke hoppet}} = (1 - p_{hop}(r))^{\Delta t}$, hvor $p_{hop}(r) = p_v(r) + p_H(r)$ i én dimension.



Figur 4.5. $P_{\text{ikke hoppet}}$ som funktion af Δt .

På figur 4.5 kan vi se, at det kan afgøres, hvor lang tid der går før ladningsbæreren hopper (ventetiden) på følgende måde:

- Der vælges et tilfældigt tal, rand, mellem 0 og 1.
- Tallet rand anvendes til at gå ind på y-aksen, og finde det tilhørende Δt -interval.
- Ventetiden er nu højre grænse for Δt -intervallet.

Vi har nu fundet en metode, som giver nøjagtigt samme resultat, som brute-force algoritmen, men som er væsentligt hurtigere, specielt for de lave temperaturer; regnetiden er proportional med antal hop, og ikke med \max_t .

Men ikke nok med det! På figur 4.5 ser vi muligheder for endnu en forbedring. Vi kan lave intervallerne på t-aksen mindre, og hvis vi gør dem infinitesimale, kommer vi frem til, at ventetiden kan findes ved:

$$\begin{aligned}
 p_{\text{ikke hoppet}}(\Delta t, r) &= (1 - p_{\text{hop}}(r))^{\Delta t} \\
 \downarrow \\
 \Delta t &= \frac{\ln(p_{\text{ikke hoppet}}(\Delta t, r))}{\ln(1 - p_{\text{hop}}(r))} \\
 \downarrow \\
 \Delta t &= \frac{\ln \text{Rand}}{\ln(1 - p_{\text{hop}}(r))}
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

På denne måde får vi faktisk indført en kontinuert tid i vores simulering, da tiden nu kan antage alle værdier.

Sandsynligheden for at partiklen hopper til venstre, når den hopper er givet ved:

$$p'_{\text{V}}(r) = \frac{p_{\text{V}}(r)}{p_{\text{V}}(r) + p_{\text{H}}(r)} \tag{4.5}$$

I ventetids algoritmen er en kørsel altså beskrevet på følgende måde:

1. Placer ladningsbæreren på en tilfældig plads, r , i gitteret.
2. Træk med lige sandsynlighed et reelt tal mellem nul og en.
3. Udregn Δt ved ligning 4.4.
4. Træk et nyt tilfældigt tal mellem nul og en.
5. Hvis tallet er mindre end $p'_{\text{V}}(r)$ så sæt $\Delta r = -1$.
... ellers sæt $\Delta r = +1$.
6. Opdater tiden: $t := t + \Delta t$;
7. Hvis $t \leq \max_t$, så gør følgende:
 - Tæl antallet af hop op med én.
 - opdater r .
 - Opdater CosSum og SinSum for hver af de brugervalgte frekvenser:
CosSum(w):=CosSum(w) + $\Delta r * \text{Cos}(w * t)$.
8. Hvis $t \leq \max_t$ så gå til punkt 2.
9. Den værdi der, i denne kørsel, er fundet for ledningsevnen er nu givet ved:

$(\text{CosSum}(w)^2 + \text{SinSum}(w)^2)/\text{max_t}$.
 (Vi medregner ikke konstanterne i Kubo-formlen).

Denne algoritme ligger til grund for programmet led_vt.sim (se appendix E), som er anvendt til de simuleringer, vi har foretaget i 1 dimension.

Ventetids algoritmen i 3 dimensioner.

Den tre dimensionelle udgave af ventetids algoritmen er egentlig bare en generalisering af den 1-dimensionelle. Ladningsbæreren kan nu hoppe til "venstre" eller til "højre" i de tre forskellige dimensioner. For hver dimension udregnes ledningsevnen, som i det 1-dimensionelle tilfælde (ligning 4.3), men for den enkelte dimension indgår kun de led i formlen, der svarer til hop i denne dimension. Da der ikke er nogen forskel på de tre dimensioner, skal de tre ledningsevner konvergere mod de samme værdier. Vi udregner derfor gennemsnittet, da vi på denne måde får én enkelt graf, som konvergerer tre gange så hurtigt som de enkelte ledningsevner.

For hver af gitterpladserne placerer vi hopsandsynlighederne i en tabel på følgende måde:

			$p'(3)$			
		$p'(2)$	$+p'(2)$			
	$p'(1)$	$+p'(1)$	$+p'(1)$	1
d:	1	2	3	4	5	6
Δr :	-1	1	-1	1	-1	1
d_hop:	1	1	2	2	3	3

Figur 4.6. Tabel med de kumulerede hopsandsynligheder.

I den tre dimensionelle ventetids algoritmen er en kørsel beskrevet på følgende måde:

1. Placer ladningsbæreren på en tilfældig plads, $r(x,y,z)$, i gitteret.
2. Træk med lige sandsynlighed et reelt tal mellem nul og en.
3. Udregn Δt ved ligning 4.4.
4. Træk et nyt tilfældigt tal, rand, mellem nul og en.
5. sæt $d:=1$;
6. Sålange, at $\text{rand} > p(d,x,y,z)$ så læg en til d .
7. Hvis d er et ulige tal, så sæt $\Delta r=-1$. (Der hoppes til "venstre")
 ... ellers sæt $\Delta r=+1$. (Der hoppes til "højre").
8. Sæt $d_hop:=(d+1)/2$ (Heltalsdivision, der giver den dimension hoppet er foretaget i).
9. Opdater tiden: $t:=t + \Delta t$;
10. Hvis $t \leq \text{max_t}$, så gør følgende:
 - Tæl antallet af hop op med én.
 - opdater $r(x,y,z)$.
 - Opdater CosSum og SinSum for hver af de brugervalgte frekvenser i den dimension, hvor der er hoppet:
 $\text{CosSum}(d_hop,w):=\text{CosSum}(d_hop,w) + \Delta r \cdot \text{Cos}(d_hop,w \cdot t)$.
11. Hvis $t \leq \text{max_t}$ ($=t'$) så gå til punkt 2.
12. Den værdi der er fundet for ledningsevnen, for hver af dimensionerne, d , i denne

kørsel er nu givet ved:

$$(\text{CosSum}(d,w)^2 + \text{SinSum}(d,w)^2)/\text{max_t.}$$

(Vi medregner ikke konstanterne i Kubo-formlen).

Denne algoritme ligger til grund for programmet led_vt3d (se appendix E), som vi har brugt til simuleringer i tre dimensioner.

Overordnet forløb.

I dette afsnit beskriver vi vores arbejde med simuleringen. Dette skal danne en baggrund for de konklusioner, vi senere drager om vores erfaringer med simulering. Arbejdet kan deles ind i 3 faser (forståelsesfasen, programmeringsfasen og resultatfasen), som i det tidlige forløb overlappede hinanden.

Fase 1: Forståelsesfasen.

Vi startede med at prøve at forstå fysikken bag simuleringen. Dette arbejde bestod dels i at forstå de fysiske overvejelser, der indgik i modellen, f.eks. hvorfor den kunne udvise en frekvensafhængig ledningsevne, og dels i at forstå grundlaget for Kuboformlen. Det viste sig, at teorien bag formelen var dele af den lineære responsteori især FD-teoremet, som vi brugte meget energi på at sætte os ind i. Vi må dog indrømme, at vi ikke har opnået den samme fortrolighed med den bagvedliggende teori, som den vi regner med en uddannet fysiker må have, når han simulerer et system.

Fase 2: Programmeringsfasen.

Mens vi arbejdede med at forstå fysikken bag, lavede vi de første udgaver af programmet (brute-force algoritmen). Da vi kørte disse, viste det sig, at ledningsevnen ikke konvergerede, lige meget hvor lang tid programmet kørte. Fejlen lå i, at vi ikke midlede over flere kørsler, idet en enkelt random walk ikke konvergerer, som beskrevet i interviewet med Jeppe Dyrre (se app A).

Efter dette implementerede vi ventetids algoritmen i programmet, således at det kørte væsentligt hurtigere end den første version. Vi forsøgte desuden at optimere programmet yderligere ved at tabellere cosinus og sinus, dvs. regne alle værdierne ud en gang for alle i starten af programmet for derved at spare tid. Herefter gik vi igang med en række simuleringer.

Disse gav pæne og glatte grafer (se fig. 4.7), men forløbet af graferne svarede ikke helt til det forventede, og potensen s var over 1, hvilket var i fuldstændig modstrid med den forventede løsning (se fig. 4.4).

Uoverenstemmelsen udløste en række overvejelser af modelmæssig og computermæssig art. Modelovervejelserne drejede sig om problemerne ved at simulere i 1 dimension, idet ladningsbærerne i 1 dimension ikke har mulighed for at hoppe rundt omkring en stor energibarriere, som den kan i 2 og 3 dimensioner. Derfor kan den blive spærret inde i et lille område af gitteret i lang tid, hvilket medfører at max_t skal gøres meget stor, for at ladningsbæreren kommer rundt i hele gitteret.

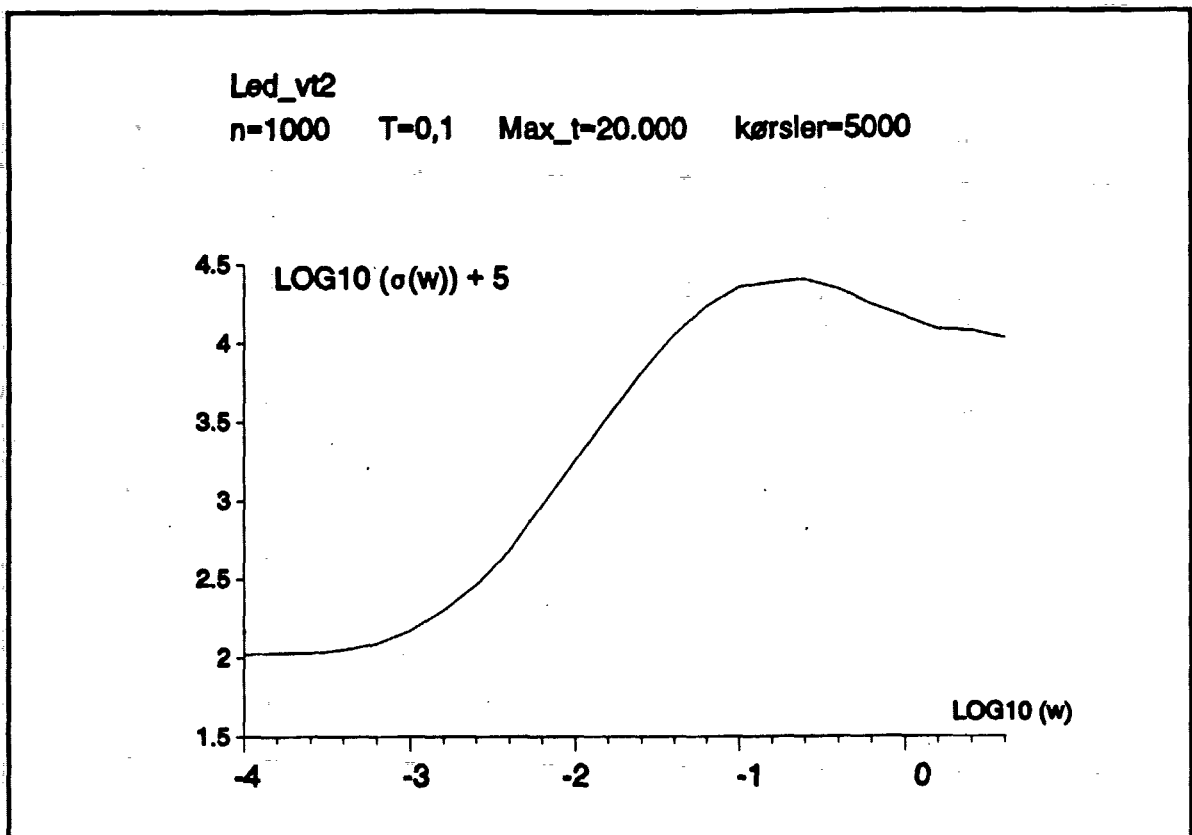


Fig. 4.7. 1-dimensionel simulering i modstrid med forventet løsning. $s = 1,43$.

Computerovervejelserne bestod i, at vi forsøgte at vurdere betydningen af afrundingsfejl, bl.a. at vurdere usikkerheden ved at tabellere cosinus og sinus værdierne.

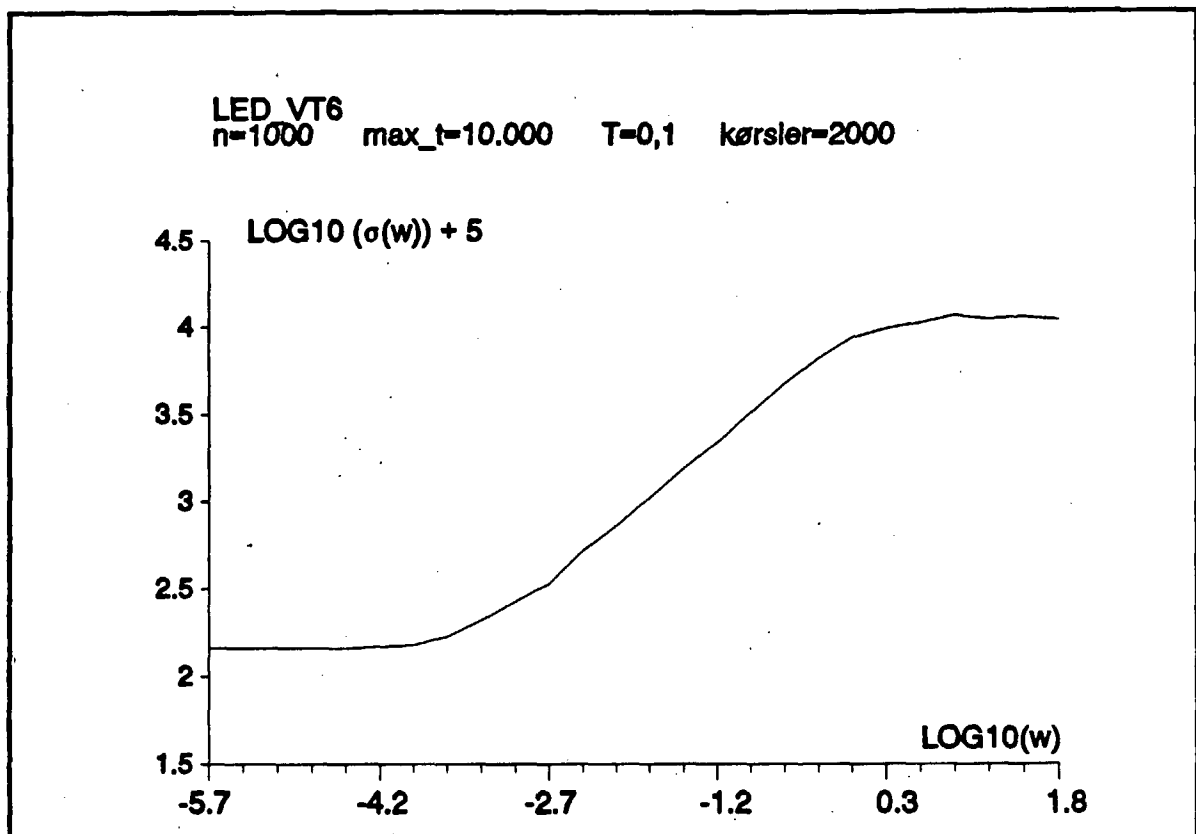
Fejlen viste sig at være, at vi havde fortolket størrelsen τ_j , som indgår i Kuboformlen, som tiden imellem to hop. Dette er forkert, idet τ_j angiver tiden fra starten af simuleringen til det j 'te hop, som nævnt ved ligning 4.3. Dette var en dum fejl, der skyldtes, at vi pga. tidspres begyndte på at programmere, før vi havde forstået den anvendte udgave af Kuboformlen.

Efter at fejlen var rettet, begyndte simuleringerne at give gode resultater, hvorefter vi lavede en række simuleringer i både 1 og 3 dimensioner. Desuden viste det sig, at tabelleringen af cosinus og sinus ikke gav nogen særlig hastighedsforbedring, hvis vi ville undgå for store afrundingsfejl, hvorfor vi droppede denne version af programmet.

Fase 3: Resultatsfasen.

Vi startede med at simulere i 1 dimension. Her undersøgte vi resultaternes afhængighed af \max_t (se fig. 4.8. og fig 4.9). Det viste sig, at $\sigma(0)$ niveauet faldt efterhånden som \max_t steg, mens hældningen af grafen og det øvre niveau blev uafhængigt af \max_t for ret små \max_t .

Da resultaterne i 1 dimension lignede den forventede løsning, gik vi videre til 3 dimensioner, fordi vi mente, at det var mere realistisk og dermed mere interessant at simulere i 3 dimensioner. Vi undersøgte altså ikke den 1 dimensionelle udgave af simuleringen til bunds.

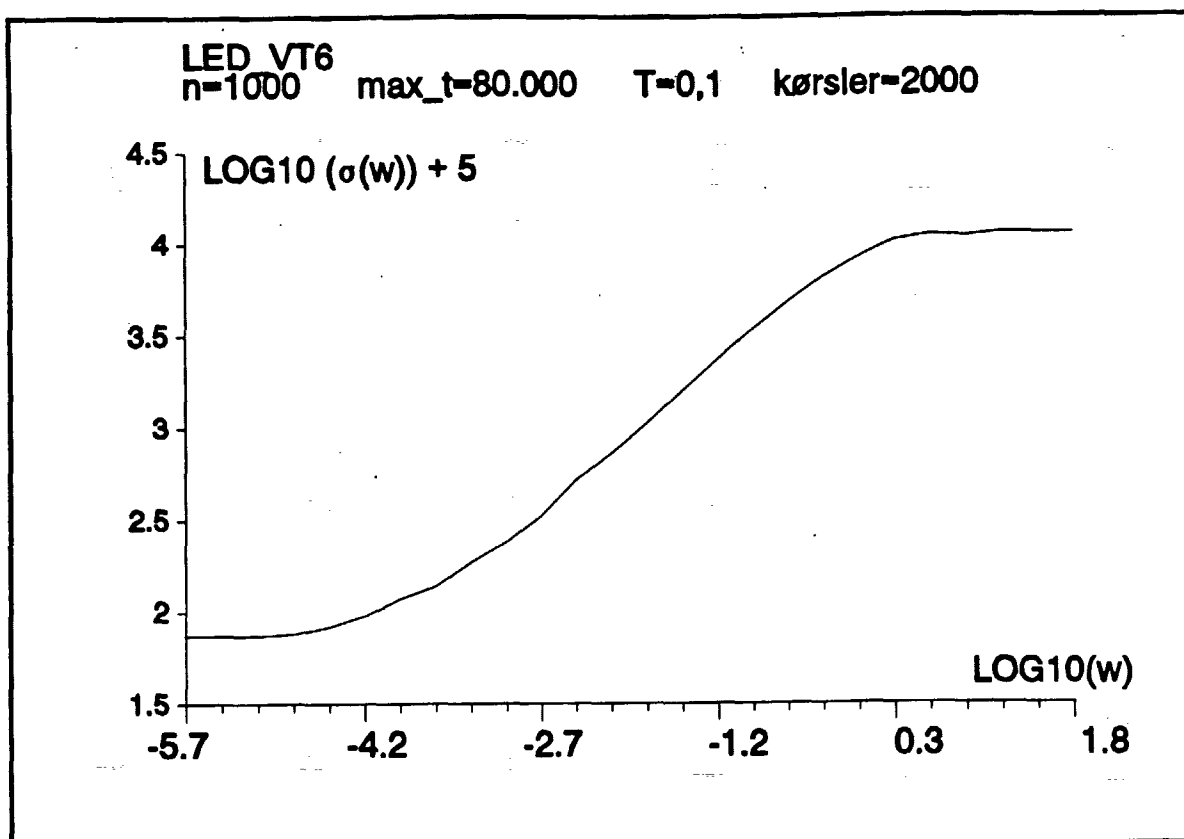


Figur 4.8. Graf for 1-dimensionel simulering med lille max_t. $s = 0,54$.

Vi startede med at fastlægge resultaternes afhængighed af gitterstørrelse, seed og max_t. Seed er en parameter, der afgør den rumlige fordeling af energibarrierer i gitteret, dvs. hvis seed vælges ens hver gang, der simuleres, og gitterstørrelsen ikke ændres, vil den rumlige fordeling af energibarriererne være den samme.

Resultaterne viste sig at være uafhængige af gitterstørrelsen og seed. Det var altså ligegyldigt, hvordan energibarriererne fordelte sig i gitteret, hvilket også var forventet, idet at lave to simuleringer med forskellig seed svarer til at måle ledningsevnen på to prøver af det samme amorf stof. Uafhængigheden af gitterstørrelsen var mere uventet, idet mange andre simuleringer f.eks. simuleringen af Ising modellen afhænger ret stærkt af gitterstørrelsen.

Afhængigheden af max_t var som i den 1 dimensionelle udgave, idet $\sigma(0)$ niveauet var faldende med øget max_t, mens resten af grafen var uafhængig af max_t. Vi lavede en række simuleringer med temperaturen $T = 0,05$, hvor vi fordoblede max_t, indtil $\sigma(0)$ niveauet stabiliseredes, hvilket skete for max_t lig 160.000 (se figur 4.10). Grunden til, at $\sigma(0)$ niveauet er faldende med øget max_t, er, at dette niveau fastlægges af den højeste energibarriere, ladningsbæreren kommer over i løbet af en simulering. Hvis max_t er for lille, dvs. der laves ikke særligt mange hopforsøg pr. kørsel, kommer ladningsbæreren ikke over særligt høje energibarrierer, og kan derfor blive spærret inde i en lille del af gitteret. Når max_t er så høj, at ladningsbæreren kommer rundt i hele gitteret under en simulering, vil en forøgelse af max_t ikke medføre, at ladningsbæreren kommer over højere energibarrierer, hvorfor $\sigma(0)$ niveauet bliver uafhængigt af max_t.



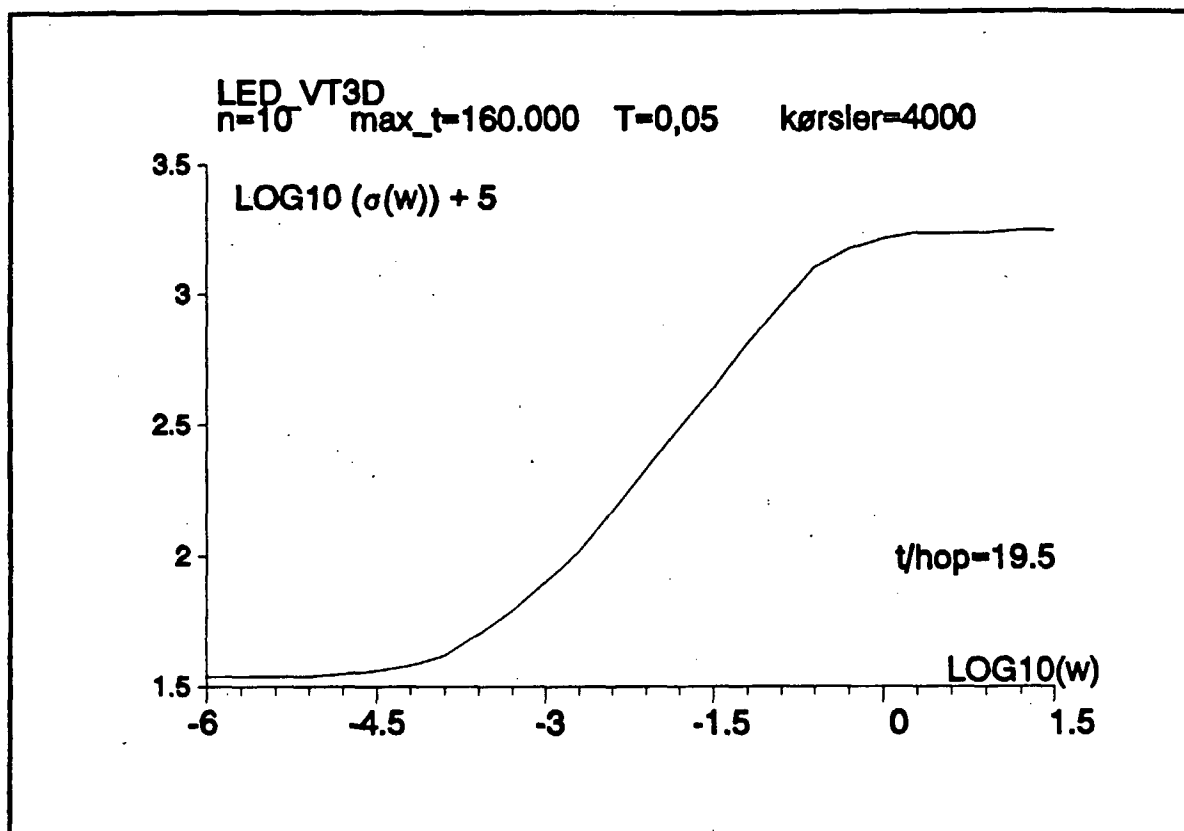
Figur 4.9. 1-dimensionel simulering med større \max_t . $\sigma(0)$ faldet. $s = 0,57$.

Jeppe pointerede, at fastlæggelsen af niveauet var vigtig, når resultaterne skulle sammenlignes med den forventede løsning, idet dette niveau var med til at fastlægge, over hvor mange dekader ledningsevnen var frekvensafhængig.

Efter dette satte vi temperaturen ned til $T = 0,04$, idet vi var interesserede i, at ledningsevnen var frekvensafhængig over mange dekader for at kunne lave en ordentlig sammenligning med den forventede løsning. Når temperaturen sættes ned, bliver hopsansynlighederne mindre, hvilket svarer til, at energibarriererne er blevet højere. Derfor skulle \max_t være meget større. Igen lavede vi en række simuleringer, hvor vi fordoblede \max_t . Dette resulterede i en simulering med \max_t lig 640.000, men desværre uden at $\sigma(0)$ niveauet var stabiliseret (se fig. 4.11).

Denne tog ca. 2 døgn på en SUN SPARC workstation. Derfor gik vi over til i simuleringerne kun at udregne ledningsevnen for 1 frekvens beliggende i $\sigma(0)$ området for derved at fastlægge niveauet. Desværre oplevede vi, at selv en \max_t lig 10.240.000 var for lille. Simuleringen blev altså for beregningskrævende for $T = 0,04$, hvilket medførte, at vi måtte opgive at gå længere ned i temperatur.

I stedet undersøgte vi temperatur afhængigheden i intervallet $T = 0,05-0,06$ (se fig 4.12). Grafen viser, at $\sigma(0)$ niveauet er mere temperaturafhængigt end vekselstrøms ledningsevnen, da afstanden mellem graferne bliver mindre, når w øges. Endvidere ses det, at s er stigende for faldende T . Dette stemmer fint overens med de eksperimentelle resultater og den forventede løsning.



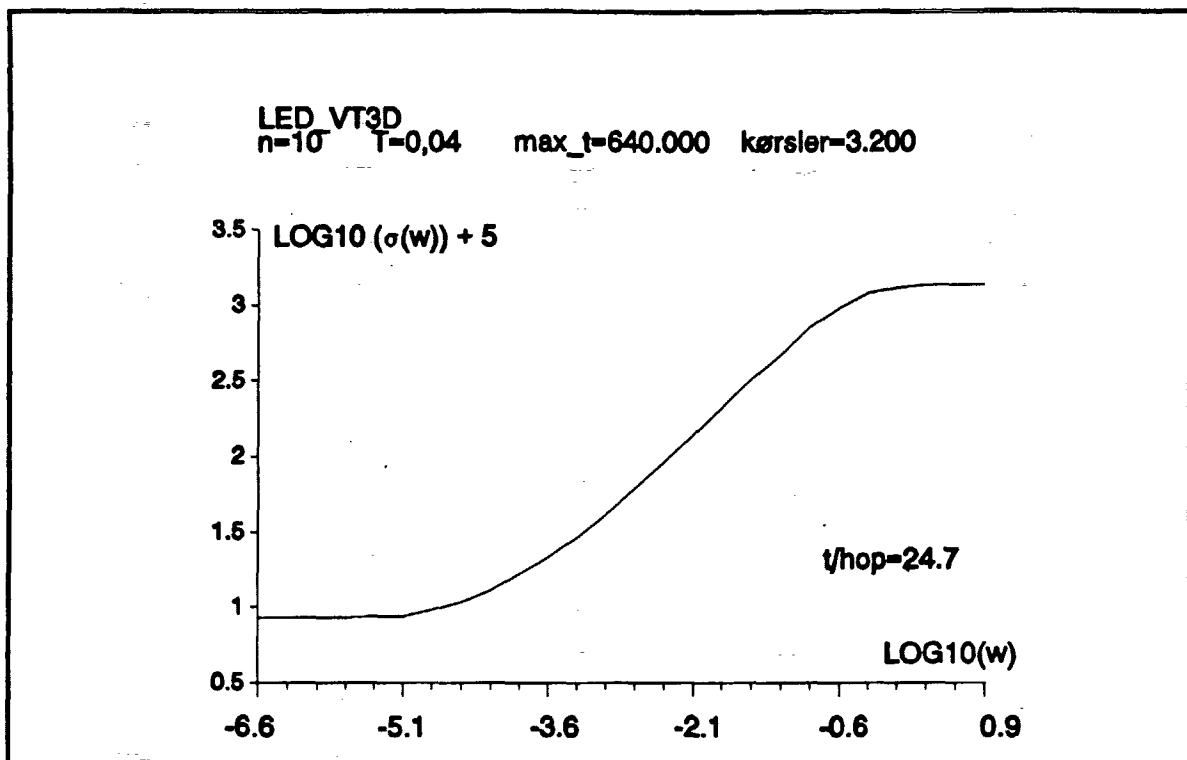
Figur 4.10. 3-dimensionel simulering med $T = 0,05$. $s = 0,52$.

De enkelte grafer skulle ifølge teorien kunne skaleres, således at alle kom til at ligge på den samme masterkurve. Dette skulle gøres ved at forskyde graferne 45° mod øvre højre hjørne. Dette har vi ikke gjort, men hvis man mere indgående skulle tjekke overensstemmelsen mellem vores resultater og den forventede løsning, skulle masterkurven plottes sammen med den forventede løsning, således at det direkte kunne ses, hvor sammenfaldende de to kurver var.

Videre arbejde med simuleringen.

Vi oplevede jo, at simuleringen blev for beregningskrævende, når vi satte temperaturen ned. Da de lave temperaturer er de mest interessante, ville det være oplagt at prøve at gøre algoritmen hurtigere. Vi har en svag ide' til, hvordan dette kan gøres. Det drejer sig om en grundlæggende ændring af algoritmen, som vi ikke vil gå nærmere ind på her.

Man kunne også arbejde videre mere ideudviklende ved at teste simuleringens afhængighed af, hvordan størrelsen af energibarriererne er fordelt, f.eks. ændre fordelingen fra ligeligt til Gauss fordelt.



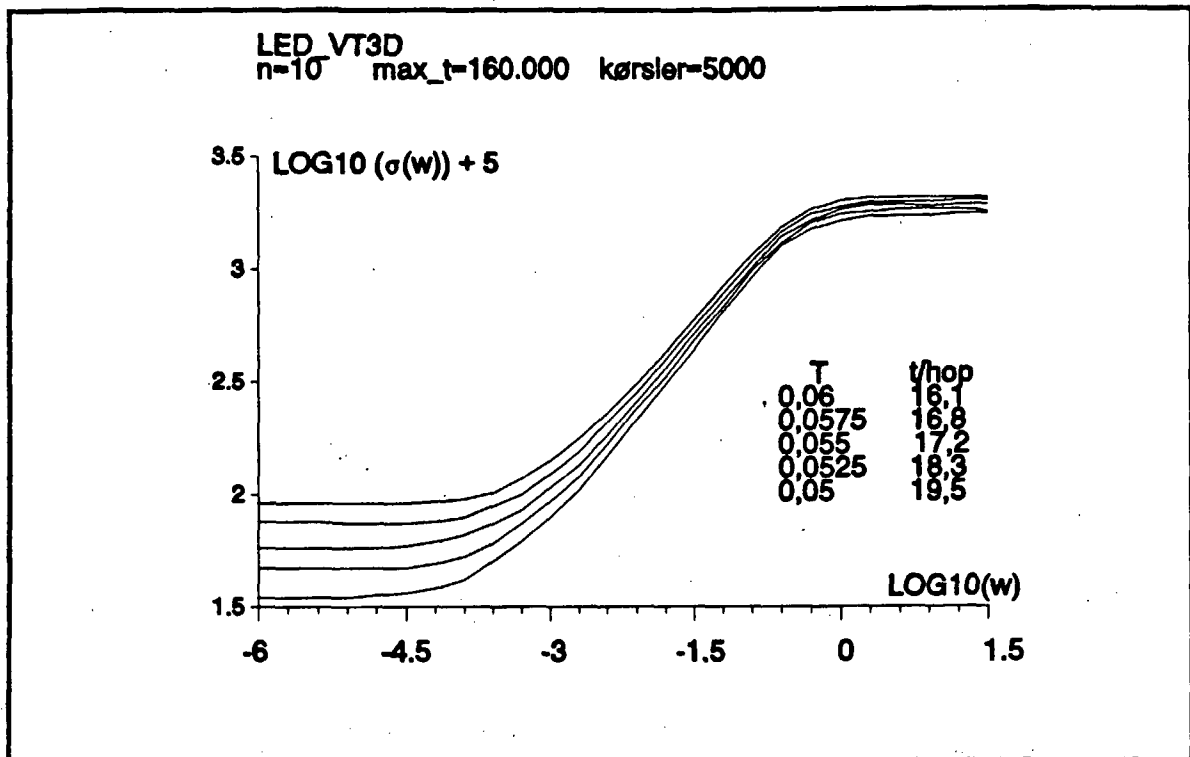
Figur 4.11. 3-dimensionel simulering med $T = 0,04$. $\sigma(0)$ ikke stabiliseret. $s = 0,59$.

Erfaringer med simulering.

I dette afsnit beskriver vi de erfaringer, vi har opnået i vores arbejde med simuleringen, som vi synes har relation til det overordnede spørgsmål om fysikernes arbejdsmetoder.

Vi valgte en form af Kuboformlen, der medførte en matematisk omskrivning via Wiener-Khinchins teorem, som vi opgav at sætte os ind i. Det var måske en fejl, at anvende denne form af Kuboformlen, idet det gjorde, at vi havde svært ved at fortolke det fysiske indhold, hvilket medførte fejlfortolkningen af τ . Til gengæld var denne udgave datalogisk set ret nem at simulere. Vi fandt senere ud af, at vi kunne have valgt en udgave af formlen, som ville have været nemmere at relatere til modellen. Dette er en vigtig faktor at tage med i sine overvejelser, når man skal vælge, hvilket udtryk der skal bruges til at beregne de størrelser, man er interesseret i.

Vi oplevede, at noget af det mest lærerige var, når simuleringerne gav resultater, der var i uoverensstemmelse med det forventede. Idet man for at finde en forklaring fordybede sig i intensive model og datalogiske overvejelser. Nogle af disse overvejelser var mere frugtbare for ens fysiske forståelse end andre. Bl.a., da vi fik en for stor s -værdi i 1 dimension, overvejede vi, hvordan ledningsevne i 1 dimension skulle fortolkes, hvilket gjorde, at vi fik uddybet vores forståelse af modellen. Til de mindre frugtbare overvejelser hørte de numeriske betragtninger omkring afrundingsfejl.



Figur 4.12. Temperaturafhængighed i 3-dimensioner. Nederste graf svarer til laveste temperatur.

Hvad angår fejl smækker computeren dem lige i hovedet på en. Dette kan være ubehageligt for ens forfængelighed, men giver en effektiv arbejdsproces, idet man ved, at det der kommer ud af simuleringen er et direkte resultat af det, man selv har puttet ind.

Det rent datalogiske kan man bruge meget tid på, hvilket er et nødvendigt onde. Vi oplevede dog, at da vi optimerede programmet ved at indføre ventetids algoritmen, erkendte vi pludselig, at modellen grundlæggende set er formuleret med en kontinuert tid.

Arbejdet med simuleringen mindede en hel del om eksperimentelt arbejde, idet de simuleringer vi udførte for at fastlægge afhængigheden af gitterstørrelse, seed, og max_t er analoge til at kalibrere et forsøg. Mens den fase, hvor vi undersøgte temperaturafhængigheden, svarer til selve forsøget, hvor man fastlægger systemets afhængighed af de fysisk vigtige parametre.

Fysikernes arbejdsmetode.

Nogle af de fejl vi har lavet, formoder vi, at en uddannet fysiker ikke ville lave, idet han på forhånd vil have en bedre forståelse af det fænomen, han simulerer. Til gengæld vil andre typer fejl altid opstå, så vi mener, at fysikeren vil opleve det samme som os, nemlig at fejl fremprovokerer forståelse.

Vi har ikke oplevet uventede resultater (som ikke skyldtes fejl), men er overbeviste om, at sådanne resultater i endnu højere grad end fejlene giver øget forståelse.

Faren for at bruge meget tid på datalogiske og numeriske overvejelser, som ikke er særligt befordrende for den fysiske erkendelse, er også reel for fysikeren. Disse overvejelser kan dog også som nævnt nogle gange give en dybere forståelse.

Et af formålene med simuleringen var at bekræfte de approksimationer, Jeppe havde foretaget. Dette mål nåede vi delvist, idet simuleringsresultaterne og den forventede løsning så ens ud med det blotte øje. En mere præcis sammenligning ville som nævnt være at fitte simuleringsresultatet til den forventede løsning. Dette gjorde vi ikke, da det er mere relevant først at arbejde på at nedsætte temperaturen i simuleringen, således at man får flere dekader at sammenligne med.

Kildefortegnelse.

- 1) Jeppe Dyre. "The random free-energy barrier model for ac conduction in disordered solids." J.Appl.Phys., Vol. 64, No. 5, 1 September 1988.
- 2) Jeppe Dyre. "Some remarks on AC conduction in disordered solids". IMFUFA tekst nr. 207, RUC, 1991.
- 3) Peder Voetmann Christiansen. "Semiotik og systemegenskaber". IMFUFA tekst nr. 22, RUC, 1979.

Kapitel 5.

Diskussion.

Fordele og ulemper ved simulering.

Den store force ved en computersimulering er, at det er op til personen, der udfører simuleringen, at tilrettelægge sin egen modelverden på en passende måde. Man er i bogstaveligste forstand "herre" over sit eget modelunivers og er derfor ikke bundet af de grænser, som naturen på forhånd har givet i et traditionelt eksperiment.

Man kan således ændre eller fjerne faktorer, der indgår i en naturlov for dermed at finde ud af hvilke faktorer, der er essentielle for systemets opførsel. Således kan simuleringen bruges til at forstå "naturen" i et system.

I de tilfælde hvor man har styr på teorien bag, kan man bruge computeren til at udføre forsøg uden at bekymre sig om de traditionelle fejlkilder og andre praktiske begrænsninger. F.eks. anvender man inden for QCD i vid udstrækning simulering, da det bliver sværere og sværere, jo mindre partiklerne er, at udføre eksperimenter med dem. Men ved arbejdet med simuleringer kommer der andre fejlkilder såsom approksimationer ved opstillingen af modellen og afrundingsfejl i de numeriske beregninger.

Simuleringer er tit mindre ressourcekrævende end tilsvarende eksperimenter. Derfor er det også oplagt, at benytte computersimuleringer i forundersøgelser til og optimering af eksperimenter, inden man kaster sig ud i dyre eksperimenter. Et eksempel på dette er forskningen efter høj- T_c superleder materiale, som vi har omtalt i kapitel 3.

Med computersimuleringer er det blevet muligt at få visualiseret processen i modellen, dvs. den tidlige udvikling. Dette har åbnet muligheden for en interaktiv og dermed mere kreativ arbejdsform, hvor modellens parametre ændres i realtime, hvilket giver en øget indsigt i modellens dynamik. Et problem kunne være, at det er fristende at overgå til en arbejdsform, hvor man sidder og prøver sig frem, indtil modellen udviser den forventede opførsel. Man kan således, hvis man ikke en gang imellem stopper op og tænker sig om, miste følingen med modellen. Dermed går den fysiske forståelse også tabt. Det er dog betryggende at høre de interviewede fysikere sige, at de lægger stor vægt på, at man skal vide præcis, hvordan en simulering fungerer, for at kunne konkludere noget ud fra den.

Der er mulighed for at visualisere simuleringens resultaterne, så systemets udvikling kan studeres som en film. Det giver en ny kilde til forståelse, at kunne studere modellens dynamiske opførsel såsom molekylernes bevægelser i en gas. Forståelsen af fænomener er tit ensbetydende med en visuel forestilling; computeranimationen giver en hjælp på dette område.

Resultaterne fra både eksperimenter og simuleringer kan visualiseres lettere med en computer, hvadenten det er en graf eller en lille film, der skal fremvises. Grupper, der kan have vanskeligt ved at kommunikere med hinanden, kan langt bedre sammenligne deres resultater vha. visualisering. En graf er langt nemmere at tolke end komplicerede formler med tvivlsomme approksimationer.

En fordel ved simuleringer er, at simuleringsfysikere indenfor forskellige fagområder har fået et fælles sprog i form af algoritmer – f.eks kan folk, der selv laver Monte Carlo simuleringer, rimeligt let gennemskue en anden Monte Carlo-simulering, selvom emnet er et andet. Man kan hurtigere og nemmere gennemskue rigtigheden af en teori eller approksimation, som ligger udenfor ens felt. I faglige artikler med baggrund i en simulering, er det ikke almindeligt at nævne algoritmen, der ligger til grund for simuleringen; det er resultatet af forskningsarbejdet der publiceres. Dette informationstab udgør et problem, da det kan være svært for forskere med interesse indenfor samme fagområde at opnå en mere nuanceret viden om et givet forskningsresultat. Et andet problem er, at det bliver umuligt at reproducere resultaterne i computersimuleringen

Når et modelproblem skal simuleres, er man nødt til at beskrive sin model i algoritmer. Dette hænger på, at computeren i bund og grund er "dum" og derfor eksplicit skal have forklaret, hvad den skal foretage sig. Herved tvinges man til at gennemtænke processen i sin model og ser den således fra en ny synsvinkel. Når man arbejder i algoritmer arbejder man ikke med lighedstegn men med tildelingstegn, som nærmest kan betegnes som et "retningsbestemt" lighedstegn. Dette, og selve strukturen i en algoritme, indebærer at årsagssammenhængen i modellen træder frem. Et sådant sammenhæng er praktisk taget umuligt at udlede af matematiske formler.

En yderligere fordel ved at opskrive en model algoritmisk er, at man med algoritmer kan beskrive processer, som ikke kan oversættes til matematik. Et eksempel på dette er strålings-skade kaskader: En elektron, der med stor energi, skydes ind på en plade bly. Der vil med en vis sandsynlighed udsendes fotoner, der igen med en vis sandsynlighed vil forårsage, at der udsendes en ny elektron og positron, der hver især med en vis sandsynlighed giver anledning til, at der udsendes en foton, således at man til sidst har en hel kaskade af partikler. Der findes ingen (simpel) matematik der kan beskrive en sådan proces, men med en algoritme (og en computer) kan man beskrive processen. Man kan sige, at algoritmen udgør den lov, der beskriver processen [1].

Ulemperne ved brugen af algoritmer er, at de kan være uoverskuelige for andre end opfinderen af dem. I den matematiske formalisme er ligninger fremstillet kort og præcist, men en bred anerkendt formalisme til beskrivelse af algoritmer er endnu ikke udviklet, og en programudskrift er tit meget uoverskuelig.

En overvejelse om valget af integrationsmetode, og begrebet ergodisitet.

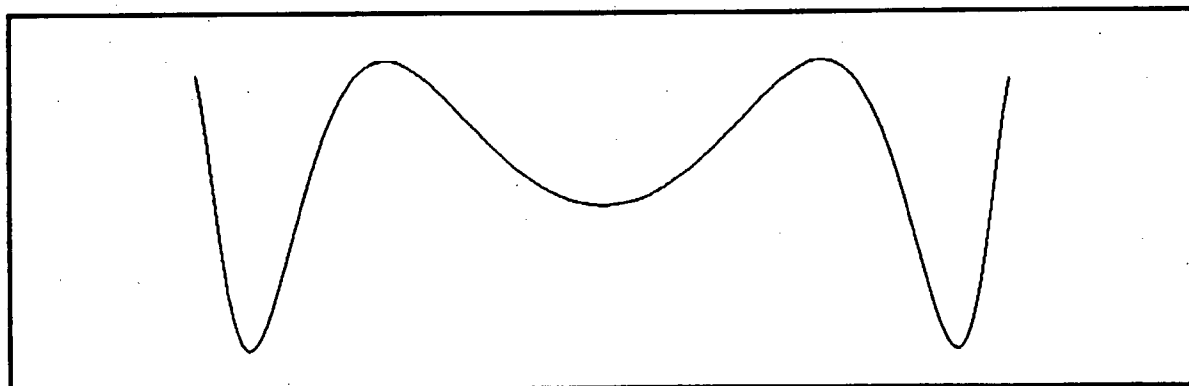
Nogle af medlemmerne i gruppen har tidligere benyttet integrationsmetoden 4. ordens Runge-Kutta med variabel skridtlængde, da det er denne metode, der benyttes i det generelle simuleringsprogram Continuous Time Simulations (CTS). Programmet er udviklet af Peder Voetmann Christiansen og er tilgængeligt på IMFUFA's computer-netværk. Dette kom frem i vores interview med Søren Toxværd, hvilket ledte ham ind på et emne, som han mener ikke er alment kendt og sjældent ses i litteraturen. For at provokere os, som han sagde, påstod han, at det ville være en fejl, hvis man benyttede en Runge-Kutta integrationsmetode, i den type simuleringer som han foretager.

Som det står refereret i appendix A, kan det være dunkelt, hvad han egentlig mener med sin provokation, og vi følte os heller ikke særlig provokerede under selve interviewet. Vi har dog senere fulgt op på kommentaren.

I en brevudveksling har vi fået uddybet, hvad Søren Toxværd mener, og derved erfaret, at kritikken af Runge-Kutta integrationsmetoden er, at en simulering, der benytter denne integrationsmetode, ikke er ergodisk. En ergodisk simulering er en simulering, for hvilken tidsmiddelværdierne er lig ensemblmiddelværdierne. Det kan udtrykkes således, at systemet kommer ud i alle afkroge af faserummet. I en simulering af et problem inden for den statistiske mekanik, må man sikre denne ergodiske egenskab ved sin algoritme, da det ellers kan afstedkomme, at systemet vil befinde sig i et snævert område af faserummet, hvorved en tidsmidling som man typisk foretager i en Molecular Dynamics-simulering, ikke vil være et udtryk for hele systemet.

Søren Toxværd skriver, at den ergodiske egenskab sikres ved at den integrations metode, man benytter, er symmetrisk i tiden. Det er nødvendigt at forklare hvad der menes med, at metoden er symmetrisk i tiden, da dette kan opfattes på to måder.

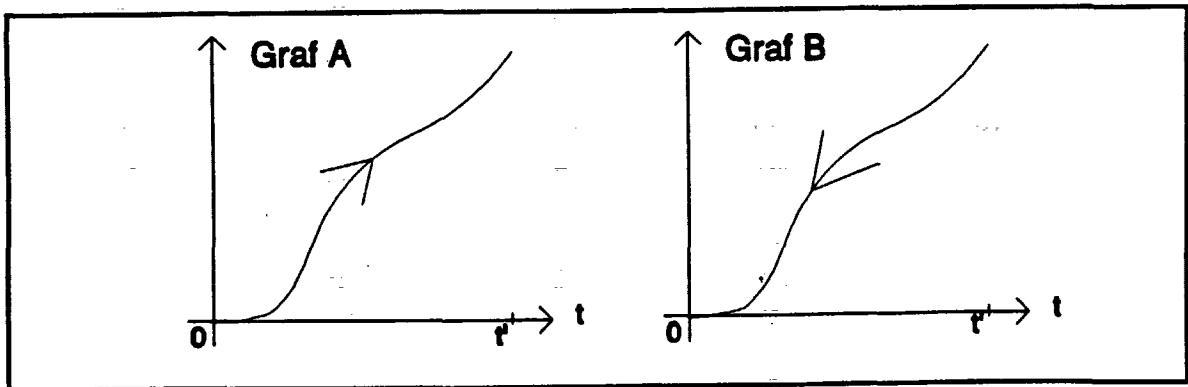
Man kan opfatte symmetri i tiden således at to simuleringer med samme begyndelsesbetingelser, der starter i tiden lig nul men med forskellig retning af tiden og med modsatrettede hastigheder, tilsammen skal give et symmetrisk billede omkring $t=0$ (se fig. 5.1). Men det er ikke denne betydning af begrebet, som Søren Toxværd benytter sig af, og Runge-Kutta metoden vil da også opfylde dette.



Figur 5.1. To kørsler med samme begyndelsesbetingelser men modsatrettede hastigheder og forskellig retning af tiden. Kørslerne giver et symmetrisk billede omkring $t = 0$.

Man skal snarere opfatte symmetribegrebet som "backtracing", hvormed der menes, at det simulerede system vil komme tilbage til sit udgangspunkt, hvis man vender tiden under en simulering. Systemet vil følge det samme spor tilbage til sit udgangspunkt (se fig. 5.2). Dette kan en Runge-Kutta metode ikke præstere, men dens force er, at den er præcis. I statistisk mekanik er denne præcision ikke det vigtigste, da det ikke er hvert enkelt molekyles bevægelser men en middelværdi, man er interesseret i. I en simulering indenfor statistisk mekanik er der vigtigere, at sikre at integrationsmetoden er ergodisk.

Ud fra dette kan vi konkludere, at det ikke er trivielt at vælge den rigtige integrationsmetode, og der bliver stadig udviklet flere integrationsalgoritmer. Søren Toxværd håber iøvrigt snart at have udviklet en ny og bedre til sine simuleringer.



Figur 5.2. Graf A viser en kørsel fra tiden $t = 0$ til t' . På graf B er tiden blevet vendt, dvs. den går tilbage fra t' til 0 - systemet følger samme spor tilbage til udgangspunktet.

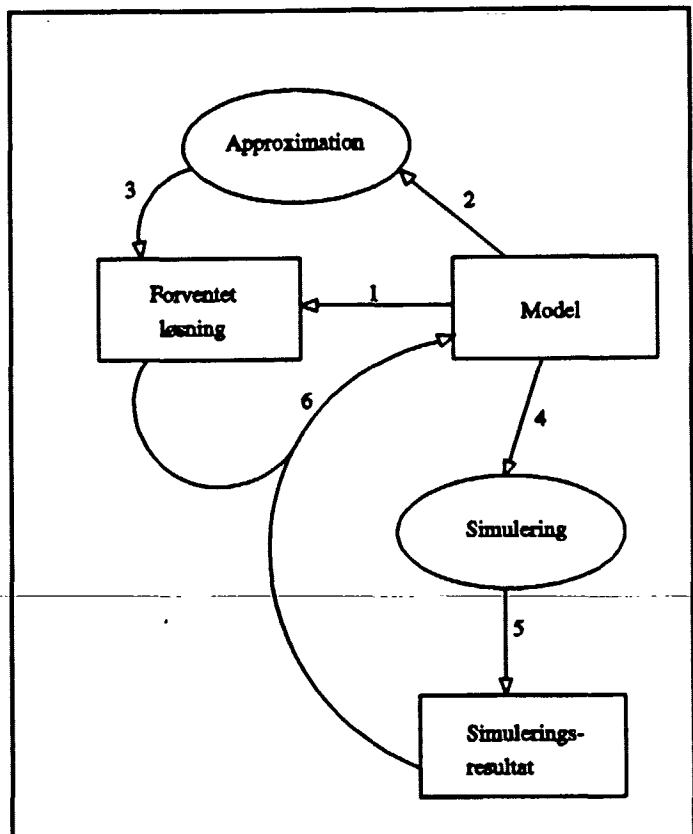
Arbejdsmetoder.

Gennem interviewene og vores egne simuleringer har vi dannet os et billede af, hvordan arbejdsprocessen er, når man arbejder med simuleringer. Dette har resulteret i, at vi nu kan opstille en figur til illustration af simuleringsprocessen (se Figur 5.3.).

Den kasse i figuren, der kommer først i en kronologisk beskrivelse af simuleringsprocessen, er modellen. Fysikere opstiller deres modeller dels ud fra eksperimentelle data og dels ud fra forskellige teoribygninger. Herudfra danner de sig et billede af, hvordan en løsning af modellen vil se ud. Man vil i de fleste tilfælde forsøge at lave en analytisk (approximativ) løsning af modellen, hvis dette er muligt (pil 2 og 3).

Ud fra den opstillede model og de praktiske begrænsninger ved simuleringen af denne vil man altid have en forventning om, hvordan simuleringens løsning af modellen vil se ud (pil 1). F.eks. kan man ikke forvente en helt skarp faseovergang i simuleringen af Ising-modellen, da denne foretages med en endelig gitterstørrelse.

Disse tre ting fører til, at fysikeren har en ide om, hvad resultatet af simuleringen vil blive (forventet løsning).



Figur 5.3. Grafisk illustration af simuleringsprocessen.

På dette tidspunkt begynder programmeringsarbejdet, der i store træk består i, at modellen først algoritmiseres, så den egentlige simulering kan laves (pil 4). Allerede her er simulering et nyttigt hjælpemiddel, fordi modellen skal beskrives meget detaljeret og eksakt, for at den kan implementeres i en computer. Dette kan bevirke, at en klarere forståelse af modellen opnås.

Herefter laves den første række simuleringer (pil 5), som sammenlignes med den forventede løsning og modellen (pil 6). Det vil ofte være sådan, at resultatet af simuleringen ikke stemmer overens med det forventede i første omgang. Den umiddelbare reaktion på dette vil være at lede efter programmeringsfejl og fejl i de brugte numeriske metoder (f.eks. afrundingsfejl). Uoverensstemmelsen kan også skyldes fejl i algoritmiseringen af modellen, hvor man under den idealisering der sker, har vurderet betydningen af nogle parametre forkert. Processen hvor man leder efter disse fejl skal dog ikke betragtes som direkte tidsspilde, da det, at man tvinges til at overveje algoritmerne og modellen, er med til at give én, en bedre forståelse af modellen.

Når fejlene er rettet, kan fortolkningen af simuleringseresultaterne begynde. For at være i stand til at give en entydig fortolkning må man udføre en hel del simuleringer, der fastlægger resultatets afhængighed af de parametre, der ikke har nogen fysisk fortolkning, men udelukkende er et produkt af, at systemet simuleres. Dette kan gøres ved at ændre én parameter, mens de andre fastholdes. Denne del af simuleringen minder en del om kalibrering af forsøgsopstillingen i eksperimentelt arbejde, idet man forsøger at eliminere simuleringens indflydelse på resultatet. F.eks. skulle \max_t i hopmodellen mindst være så høj, at resultatet blev uafhængigt af den.

Når resultatets afhængighed af de "ikke-fysiske" parametre er elimineret, kan man påbegynde en række simuleringer, der beskriver modellens generelle opførsel. Dette gøres ved at de "fysiske" parametre ændres, således at afhængigheden af disse fastlægges. I hopmodellen svarer dette f.eks. til, at vi undersøger temperatur afhængigheden. Der er ikke en klar tidsmæssig grænse mellem disse to faser af simuleringen, idet de ofte vil overlape hinanden. Dette svarer, til at vi, hver gang vi ændrede temperaturen i hopmodellen, skulle undersøge, hvor stor \max_t skulle være (pil 5).

Hvis der stadig er uoverensstemmelser mellem simuleringseresultatet og den forventede løsning, kan arbejdet gå over i en mere idéudviklende fase. Her vil man, ud fra informationerne fra de allerede foretagne simuleringer, prøve at ændre i modellen, således at simuleringseresultatet kommer til at ligne den forventede løsning mere. Dette kan føre til nye teoretiske ideer.

Hvor idéudviklende en simulering er afhænger af, hvor meget der ændres i modellen. Man vil som udgangspunkt være mere tilbøjelig til at ændre i en model, hvor fundamentet for modellen ikke er særligt velkendt. Derfor bliver det afgørende for, hvor idéudviklende en simulering bliver, i hvilken grad det fænomen, der simuleres, er teoretisk velbeskrevet. Arbejdsgangen i en idéudviklende simulering ligner arbejdsgangen i den bekræftende. Man opbygger en model, hvortil man har en forventet løsning, modellen algoritmiseres og simuleres, og ud af dette får man så en løsning, som man må sammenligne med det forventede.

Simuleringer kan også være ideudviklende på en anden måde, nemlig ved at man ændrer i modellen, selvom modellen giver det forventede resultat, når den simuleres. En sådan ændring laves for at få en bedre forståelse af hvilke faktorer i modellen, der har størst betydning for et bestemt fænomen. Et eksempel herpå er at ændre fordelingen af energibarrierer i vores hopmodel for at få en forståelse af fordelings betydning for ledningsevnen.

De simuleringer fysikere laver, starter altså ofte med at være bekræftende men kan senere udvikle sig til at blive idéudviklende.

Sammenspillet mellem det mikroskopiske og makroskopiske niveau i simuleringer.

Når man simulerer, opdeler man det system man vil beskrive i mindre dele. Således beskriver man en gas med mange molekyler, og en stjerne opdeler man i delvolumener. Modellen vil altid bestå af en beskrivelse på et lavere niveau end resultatet, og resultatet af en modelkørsel på computeren vil give en beskrivelse af systemet på et højere niveau, typisk en værdi eller egenskab der er udtryk for hele systemets tilstand. Modellen består af ligninger, der giver mindstedelens vekselvirkninger, og beskrivelser af systemet på dette niveau kalder vi mikroskopisk. Resultatet af simuleringen vil være en midling af en fysisk størrelse eller en observation af en egenskab for systemet. Dette kalder vi makroskopisk.

Forskellen i størrelsesorden mellem det mikroskopiske og det makroskopiske niveau kan være større eller mindre. Vil man beskrive turbulens i en væske ved hjælp af Navier-Stokes ligninger, er forskellen ikke stor, fordi ligningerne beskriver delvolumener af væske, som derved ikke er væsensforskellige fra hele væsken. Mens forskellen er stor, hvis man forestiller sig, at man kan beskrive samme væske vha. kvantemekanikken.

En enkelt kørsel på computeren viser udviklingen af modellen ud fra givne parameterværdier og begyndelsesbetingelser. Dette vil altid give et makroskopisk resultat ud fra de mikroskopiske begyndelsesbetingelser, men arbejdet med simuleringen kan også overordnet set gå den modsatte vej! Disse to typer simuleringer vil vi omtale i det følgende.

Man kan foretage simuleringer, der tager udgangspunkt i et makroskopisk fænomen. Formålet med simuleringen er da at finde en model, som kan beskrive dette fænomen, således at man finder de mikroskopiske egenskaber, der giver det makroskopiske fænomen. Det vil være målet at finde den simplest mulige realistiske model, der beskriver ens makroskopiske fænomen. Man kan forestille sig, at man tager en kendt men detaljeret model og forsimples den for at finde de væsentligste mikroskopiske egenskaber. Eller man kan opbygge en model mere eller mindre fra bunden og gradvist udbygge den mikroskopiske model, indtil man opnår de ønskede makroskopiske effekter.

Et tydeligt eksempel på denne type simulering er Eigil Præstgaard's simulering, som vi refererer til i appendix A. I denne simulering tog han udgangspunkt i et system af partikler med et Lennard-Jones potentiale, som han forsimplede, indtil han havde isoleret den mikroskopiske egenskab, som er afgørende for partiklernes rumlige fordeling i systemet.

Benytter man den anden type simulering, arbejder man ud fra en fastlagt model, dvs. at det mikroskopiske niveau er givet på forhånd. Simuleringen har da til formål at undersøge en egenskab af denne model. Det kunne f.eks. være en simulering på Meteorologisk Institut til at bestemme vejret de næste par dage. Eller det kunne være en simulering, der havde til formål at beskrive egenskaber ved et bestemt stof, ud fra en kvante- eller klassisk mekanisk beskrivelse.

Man har i disse simuleringer ikke til formål at stille spørgsmålstejn ved modellen, men vil gerne have et resultat, der er til at stole på, hvorfor simuleringer, hvor modellen er fastlagt, skal hvile på et velunderbygget grundlag.

Den første type simuleringer, hvor det makroskopiske fænomen er givet, har til formål at give oplysninger om, hvordan man mikroskopisk kan beskrive et fænomen. Disse simuleringer kan ikke sammenlignes med eksperimenter, da det i et laboratorium er umuligt at ændre på naturlovene. Resultatet vil altså være af en erkendelsesmæssig karakter. Den sidste type simuleringer minder derimod om eksperimenter, idet resultatet vil være et makroskopisk fænomen, som så vidt muligt er i overensstemmelse med virkeligheden. Det er altså den makroskopiske effekt, der er interessant.

Simuleringens indvirkning på genstandsområderne i fysikken.

Før man havde simulering som redskab, havde man ingen muligheder for at behandle systemer, som ikke kunne behandles analytisk. Dette betød, at man havde meget dårlige muligheder for at arbejde med systemer med en ikke-lineær beskrivelse. Dette gjorde, at man måtte linearisere de systemer, man arbejdede med, hvilket man i de fleste tilfælde betragtede som en forholdsvis god approksimation, da det typisk var nogle små led, som man så bort fra.

Efterhånden som man er begyndt at simulere systemerne inklusive de ikke-lineære led, har det vist sig, hvor fantastisk meget de kan betyde; interessante fænomener som turbulens og skyformationer kan kun beskrives ved ikke-lineære ligninger.

Den effekt simuleringen på denne måde har haft på genstandsområderne indenfor fysikken, kommer tydeligst til udtryk i området "kaos", eller mere beskrivende "studiet af komplekse systemer". Hele udviklingen af området hænger i høj grad på anvendelsen af computersimuleringer. Dette illustreres af, at James Gleick i sin populærvidenskabelige bog "kaos" tilskriver grunden til, at "kaos" opstod af en simulering udført af meteorologen Edward Lorenz.

Kaos er altså et eksempel på et helt nyt genstandsområde, hvis opblomstring kan relateres meget direkte til udviklingen af computersimuleringen. Derudover giver simuleringens indflydelse på genstandsområderne i fysik sig også til udtryk internt i de enkelte genstandsområder. Indenfor disse er det blevet muligt at beskæftige sig med mere komplekse systemer, end man kunne før i tiden, hvilket ofte har vist sig at have meget stor betydning, idet der indenfor alle fysikkens områder eksisterer ikke-lineære fænomener.

En anden effekt, der påvirker genstandsområderne, er muligheden for at simulere større og større systemer, hvilket betyder, at det bliver lettere at sammenligne simuleringens resultater (og indirekte modellen) med virkeligheden. Alt i alt har muligheden for at simulere altså

betydet, at fysikken har nærmet sig virkeligheden (altså den "naturlige" virkelighed og ikke "laboratorie" virkeligheden). Dette betyder så, at fysikken har nærmet sig andre fagområder, som f.eks. biologi og kemi, idet man ved hjælp af simuleringer begynder at kunne forklare fænomener inden for disse fag ud fra den bagvedliggende fysik.

Perspektivering.

Storm P. sagde engang, at det er svært at spå – især om fremtiden. I stedet vil vi give et bud på hvordan fremtiden vil tegne sig for fysikere, deres arbejde og for selve fysikken (Det er så dejligt uforpligtende).

Det er en interessant tanke, at man på nogle få områder indenfor computerfysikken regner med at nå (nærmer sig asymptotisk) det, man kalder den termodynamiske grænse. Det kunne betyde, at nogle typer konventionelle eksperimenter ville kunne blive afløst af computersimuleringer. Dog kræves der for at noget sådan opnås, at man kender de bagvedliggende teorier tilbunds på et mikroskopisk niveau, samtidig med at man har styr på selve simuleringsspro- cessen. Man skal altså have styr på hvilken effekt ens approksimationer medfører, når man går fra et mikroskopisk til et makroskopisk beskrivelsesniveau; men er disse forudsætninger tilstede, er det blot et spørgsmål om tid, når man betragter udviklingen i computerkraften, før konventionelle eksperimenter i disse områder er overflødiggjort af computersimuleringer.

En hage ved denne idé er, at selvom den virker meget fristende, er der endnu ingen eksempler på at den er gået i opfyldelse. Endelig kan man spørge sig selv om hvor interessante sådanne simuleringer er, når man har så meget styr på den bagvedliggende teori? Mon ikke svaret er, at disse computersimuleringer er reduceret til "slave"-eksperimenter, dvs. eksperimenter, der alligevel skal udføres for at klare en sidste "afpuddning" og "oprydning". På denne måde er der stadig brug for eksperimenterne på forskningsfronterne.

Det andet der gør, at denne idé lidt hypotetisk er, at simuleringen mere indgår i et samspil snarere end i konkurrence med det eksperimentelle arbejde. Dette skal ses på baggrund af, at vi mener, at det er teoretikerne nærmere end eksperimentalfysikerne, der bruger computersimuleringer i deres arbejde. Ofte er det sådan at teoretikernes inspiration stammer fra eksperimentelt arbejde, og at computersimuleringerne her bliver brugt som et værktøj i teoriudviklingen.

Her er det så, at et nyt spørgsmål trænger sig på: Er teoretikernes traditionelle rolle ved at blive ændret mod en slags computersimuleringsfysikere, og/eller er computerfysikken en helt ny gren indenfor fysikken? For begge problemstillinger må vi dog sige, at det er en diskussion om ord, for hvad forstår vi ved en computerfysiker og en ny gren indenfor fysikken? Mht. det første punkt er det et spørgsmål om flydende grænser. Nogle ville blive fornærmede, hvis man kaldte dem for computerfysiker, mens andre betragter det som en selvfølge. I fysikstudiet må man dog regne med, at der i fremtiden bliver mere undervisning i simulering, i takt med at simulering bliver mere alment. Måske vil man i fremtiden kunne kalde sig fysiker med simulering som speciale, eller simuleringsfysiker.

Hvis man med en ny gren mener et område i fysikken, der er væsensforskellig fra andre

områder som eksperimentel og teoretisk fysik, er det at overdrive computerens indflydelse. Derimod er det med computerens hjælp blevet muligt at "sprænge" rammerne som naturen sætter. Derved er genstandsområderne indenfor den teoretiske og eksperimentelle fysik blevet *udvidet* mht., hvad de kan beskæftige sig med.

Man må forvente, at simulering bliver et stadigt mere nyttigt værktøj, efterhånden som computerkraften stiger. Man vil kunne opnå bedre resultater med simuleringer, der tager udgangspunkt i det mikroskopiske niveau, hvilket giver en opblomstring af de mere "ingeniøragtige" simuleringer. Dette vil give en simulering en større praktisk betydning, som vi ikke har set mange eksempler på. Med tiden vil de kvantitative simuleringer blive mere præcise.

Konklusion.

Simuleringsprocessen indeholder både bekræftende og idéudviklende elementer, men udgangspunktet er, at fysikerne bruger simulering til at bekræfte eller afkræfte deres teoretiske antagelser. At simulering virker idéudviklende, er ofte en konsekvens af, at man opnår uventede simuleringsresultater. Disse "tvinger" fysikeren til at revurdere den simulerede model, og giver dermed en øget forståelse af denne, hvilket kan føre til fornyet teoriudvikling.

Samspillet mellem det mikroskopiske og makroskopiske niveau kan undersøges på to forskellige måder. Enten kan den mikroskopiske model tages for givet og de heraf følgende makroskopiske egenskaber undersøges ved simulering. Eller man har et givet makroskopisk fænomen, som man ønsker at finde de mikroskopiske love for, hvorfor en mikroskopisk model opstilles, som når den simuleres, kan reproducere det makroskopiske fænomen.

Simulering har haft stor indflydelse på udviklingen af fysikken. Den har været en afgørende faktor bag fremkomsten af det nye genstandsområde "komplekse systemer", som er karakteriseret ved at brede sig ud over forskellige fagområder. Grænserne mellem fysik og andre fagområder er hermed blevet udvisket, og fysikken har bredt sig ind på andre områder. Indenfor de traditionelle genstandsområder har simulering været med til, at man har kunnet gå fra hovedsageligt at beskrive lineære fænomener til også at behandle ikke lineære, større og mere komplekse systemer.

Især den teoretiske fysik har nydt godt af simulering, idet den teoretiske fysik med simulering har fået et værktøj, som har udvidet mængden af problemer, det er muligt at behandle indenfor fysikkens rammer. Den eksperimentielle fysik har i højere grad haft nytte af computeren til styring af forsøgsopstillinger og behandling af måledata.

Kildefortegnelse

- 1) Steven Wolfram, Scientific American, September 1984.

Appendix A.

Interviews.

Referat af interview med Tage Christensen.

Uddannelse.

Tage Christensen (TC) er uddannet på KU – som cand. scient. i fysik og blev færdig i 1986. Han lavede speciale på RUC (sammen med Boye og påbegyndt i 1984) i eksperimentelt at fastlægge egenskaber ved amorfe stoffer – specielt underafkølede væsker. Dette emne har TC beskæftiget sig med siden.

Brug af computeren.

TC bruger hovedsageligt computeren til dataopamling og styring af instrumenter i laboratoriet. Dette har medført, at man kan udfører eksperimenter, der før i tiden var umulige af lave i praksis. Det hænger sammen med det antal målinger, der skal foretages, og den mængde data, der skal behandles.

TC giver et eksempel på brugen af computeren i forbindelse med en piezoelektrisk transducer. Denne er nemlig temperaturafhængig (heldigvis) men også tidsafhængig (uheldigvis). Derfor laver TC et reference forsøg, hvor han tester transduceren ved forskellige temperaturer ud fra et fastlagt tidsskema. Når forsøgene udføres (med op til 4000 målepunkter), kan man gå ud fra, at transduceren ændrer sine egenskaber på samme måde som i referenceforsøget. De korrektioner, der skal foretages i den efterfølgende databehandling, er kun mulige, fordi man har computeren til hjælp.

Ved omregningen fra transducerens elektriske egenskaber til det målte materiales egenskaber, indgår nogle differentilligninger, som bliver uoverskuelige og derved svære at løse analytisk, når man skal tage hensyn til nogle praktiske størrelser (f.eks. er den skal, der omslutter transduceren endelig – ikke "uendelig tynd"). Det, der skal bestemmes, er en overføringsmatrice. Til at bestemme den benytter TC programmet "DERIVE". TC bruger DERIVE til analytisk at løse uoverskuelige ligninger (som i ovenstående tilfælde) og til at checke beregninger.

TC mener at computeren, specielt med programmer i samme stil som DERIVE, generelt kan – og vil – blive brugt til at man kan afprøve sine egne ideer.

Uforudsigelige resultater opnået vha. computeren.

Ved at lade computeren løse nogle grundligninger analytisk fandt TC nogle fysiske egenskaber ved sin transducer, som han ikke havde tænkt på. Dette var overraskende, idet man som regel har en fornemmelse af, hvorledes materialet opfører sig, og derefter afprøver disse teorier på computeren. Her er der dog tale om analytiske løsninger, som man i princippet kan løse i hånden (men som i praksis er for uoverskuelige). Løsningerne var med til at forklare nogle resonanser, TC så i et eksperiment.

Områder i fysikken, der er opblomstret efter fremkomsten af computeren.

Her mente TC, at computersimuleringer har gjort det muligt i praksis at bestemme faseover-
gange og kritiske eksponenter.

TC's tid foran computeren.

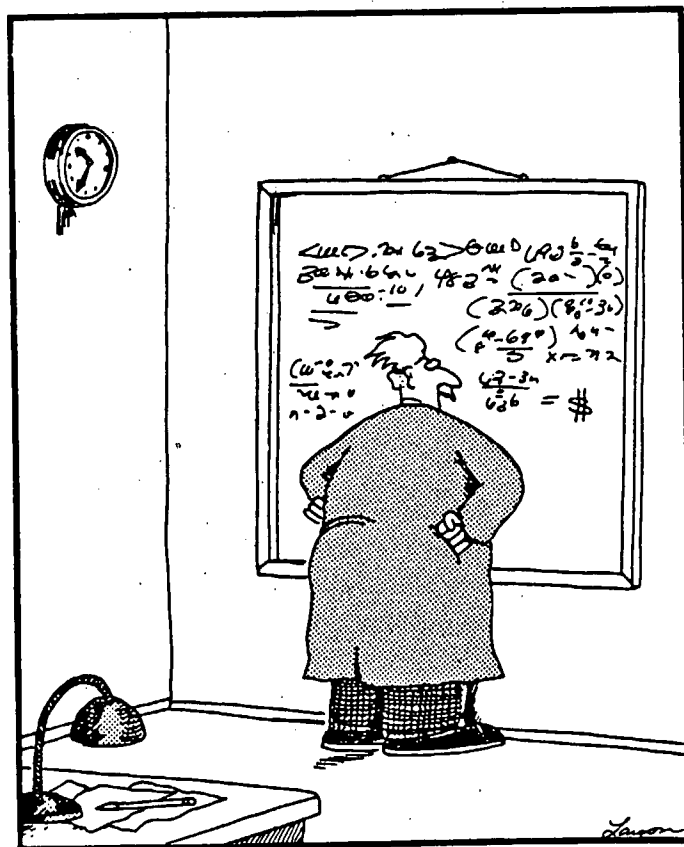
TC laver nogenlunde det samme der hjemme - som på RUC. Dvs. databehandling og programmering. Han har interesseret sig for programmering siden gymnasietiden. På universitetet har han beskæftiget sig med FORTRAN og siden COMAL-80, som han var meget glad for. TC benytter idag et dataopsamlingsprogrammeringssprog med store muligheder for at lave fejl i selve programmeringen. Han bruger det dog stadig, da omkostningerne ved at sætte sig ind i et nyt program er større end ved at blive ved det nuværende.

TC bruger ca. halvdelen af sin forskningstid foran computerskærmen (pga. den besværlige programmering), hvilket han er lidt ked af.

Den fremtidige brug af computeren i fysikken.

TC mener, at computeren i fremtiden vil blive brugt som idag, dvs. Monte Carlo- og Molecular Dynamics- simuleringer af fysiske systemer, dataopsamling og -behandling samt styring af instrumenter. Et nyt område, som efter TC's mening vil komme, er forbedrede programmer til analytiske løsninger på matematisk-fysiske problemer.

Derimod mener TC ikke, at kaosteori vil få en betydning for fysikerens arbejde ved computeren. Den vil ihvertfald ikke betyde, at noget afgørende nyt vil komme på banen.



Einstein discovers that time is actually money.

Referat af interview med Eigil Præstgaard.

Vi snakkede med Eigil Præstgaard (EP) Tirsdag d. 18/2 i ca. 1½ time.

Uddannelse.

EP er civilingeniør i kemi og blev færdiguddannet i 1959. Han startede først med at bruge computere til simuleringer i 1970'erne, og har, med store pauser ind imellem, arbejdet med simulering siden da. Han har arbejdet både med Monta Carlo og Molecular Dynamics.

Fremgangsmåde.

Et eksempel på et system, han har simuleret, er et såkaldt drevet system. Dvs. et system, som er i en stationær tilstand langt fra ligevægt, da det påvirkes udefra. (Et eksempel kunne være et pendul, som ikke svinger frit, men bliver skubbet til med mellemrum, eller den såkaldte BZ-reaktion, hvor der igennem en beholder, indeholdende en kemisk blanding, er en konstant strøm af reaktanter).

Det drevne system, han simulerede, var et molekyles diffusion igennem vand, hvor molekylet blev drevet af en kraft F , mens det blev påvirket i modsat retning af en gnidningskraft, som i det mest simple tilfælde var givet ved følgende: $F_g = n \cdot v$, hvor v er hastigheden og n er en konstant. I mere komplicerede tilfælde var gnidningskraften givet ved et ikke-lineært udtryk. Altså var fremgangsmåden at opskrive Newtons 2. lov for bevægelsen, og så introducere et mere eller mindre kompliceret udtryk for gnidningskraften i systemet. I gnidningskraften kunne indregnes et tilfældigt led, sådan at simuleringsmetoden blev en blanding af Monte Carlo og Molecular Dynamics.

Fremtidig simulering.

Et projekt, som han har på beddingen, er at simulere kemiske blandinger i ligevægt i det fortyndede område. Dette kræver en enorm regnekraft, hvorfor han skal udføre simuleringerne på en parallelcomputer i Odense. Dette område har han haft lyst til at beskæftige sig med i lang tid, men der har ikke været regnekraft nok til rådighed.

Hvilken indflydelse har muligheden for simulering for EP's valg af forskningsområde.

Hvis EP arbejder med et område, hvor det ville være nyttigt at simulere, men simuleringen ikke kan lade sig gøre pga. manglende regnekraft, er han tilbøjelig til at udskyde sit arbejde med området.

Den historiske udvikling.

Med hensyn til historien kunne han fortælle, at de første simuleringer skete i slutningen af 1950'erne – med Alder og Wainright som nogle af de første. Dengang var det forbeholdt et fåtal forskere at arbejde med computere, og det var især folk med tilknytning til militæret, som brugte dem. At bruge computere til numerisk løsning af matematiske udtryk skete tidligere, og var mere udbredt end at bruge computeren til simulering. Det væsentlige resultat af de første simuleringer var, at man fik afprøvet sammenhængen mellem sin mikroskopiske og sin makroskopiske beskrivelse. Ved at simulere et system bestående af nogle dele (atomer, molekyler osv), som vekselvirkede i overensstemmelse med ens mikroskopiske antagelser, opnåede man resultater, der kunne sammenlignes med ens makroskopiske observationer. Derved fik man en metode til at afprøve rigtigheden af ens teorier.

Styrken ved computersimulering.

Dette leder frem til en pointe, som EP lagde meget vægt på under interviewet. Styrken ved computersimuleringer er, at man kan opstille sit eget modelsystem, og derved undersøge sammenhænge, som ikke lader sig undersøge ved et eksperiment. I en simulering kan man barbære "unødvendige" parametre væk, og derved isolere de størrelser som er essentielle for det fænomen, man undersøger. Princippet i Ochåms ragekniv kan indføres i videnskaben vha. simuleringer.

Som eksempel nævnte han den rumlige fordeling af molekyler i en væske. Imellem molekylerne virker et potentiale, som afhænger af afstanden mellem molekylerne. Det er dette potentiale, som afgør hvordan molekylerne fordeles sig, men det har vist sig vha. computersimuleringer, at man kan reducere/forenkle potentialet ganske væsentligt, og stadig få den samme kvalitative fordeling af molekylerne. Derved har man fået en ide om, hvad der er afgørende for fordelingen.

At forenkle potentialet er noget, som er umuligt at gøre i et eksperiment. Altså kan man vha. computersimulering undersøge nogle sammenhænge, som uden computerens hjælp ville være umulige at undersøge. Man kan stille spørgsmål, der førhen var meningsløse at stille, idet de var umulige at besvare.

Derfor mener EP ikke, set ud fra et erkendelsesmæssigt synspunkt, at det er særligt interessant at lave simuleringer, som udelukkende går ud på at reproducere fænomener fra den virkelige verden, dvs. simuleringer som principielt godt kunne være erstattet med eksperimenter (selvom det har stor betydning indenfor ingeniørfagene og lignende). Det afgørende er, at man har mulighed for at skabe sin egen reducerede udgave af virkeligheden, hvor man selv bestemmer spillereglerne.

Problemer ved brugen af computere.

EP mener ikke, at der er nogle særlige problemer ved brugen af computere i videnskaben. Det eneste er, at det i videnskabelige artikler ikke står tydeligt, hvilke beregninger, der er foretaget, således at det er meget svært at kontrollere, de fremkomne resultater.

Uforudsigelige resultater.

Han havde ikke selv oplevet at opnå uforudsigelige resultater vha. simuleringer, men mente at pga. computeren er resultater fremkommet, som ellers ikke ville være kommet frem.

Områder der har haft nytte af computere.

Astronomi, billedbehandling. Er andre områder blevet svækket? Det er svært at sige. Det, der driver forskere imod bestemte områder, er:

1. At det er muligt at opnå resultater indenfor området.
2. At området er seksy.
3. At det indeholder penge.

Nyt stort simuleringsområde.

Simulering af molekyler af biologisk art, dvs. store komplicerede molekyler. Et eksempel er simulering af foldningen af et molekyle.

Referat af interview med Jeppe Dyre.

Uddannelse.

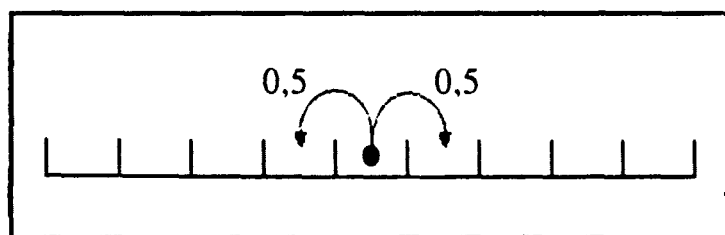
Jeppe Dyre (JD) afsluttede hovedfag i matematik i 79, og i fysik i 84, på KU. Brugen af computere (primært numeriske beregninger) indgik på dette tidspunkt i uddannelsen, i form af valgfrie kurser, som JD dog ikke tog. Grunden til han ikke interesserede sig for computere i denne periode var, at man hovedsageligt anvendte de såkaldte main-frames, dvs. super-computere, som han opfattede/opfatter som ikke-brugervenlige og besværlige at arbejde med. JD understreger dog, at han er atypisk på dette punkt, idet det i starten af 80'erne var meget udbredt blandt fysikere at anvende computere.

JD kom til RUC i 84, hvor han begyndte at anvende en mikrocomputer. Det første han brugte computeren til, var numerisk løsning af et integral (sproget var Poly-Pascal). I 1986 købte han desuden en Amstrad hjemmecomputer, som han programmerede i BASIC.

Simulering.

Når man snakker om simulering og fysik, må man gøre sig klart, hvad man mener med simulering. JD skelner mellem simulering af modeller, og numerisk løsning af ligninger.

En af de første simuleringer JD lavede, blev et eksempel på, at man med en simulering kan erkende et faktum, som man ikke umiddelbart havde overvejet. Simuleringen var en såkaldt Random-Walk:



Figur A.1. En partikel har lige stor sandsynlighed for at hoppe til henholdsvis højre eller venstre.

Man placerer en partikel tilfældigt i en streng (1-dimensional Random-Walk). Man lader nu partiklen udføre et antal skridt, hvor den med sandsynligheden 0.5 springer enten til højre eller venstre. Der vil for dette system være en diffusionskonstant givet ved ensambelmidlingen:

$$D = \frac{\langle \Delta X^2(t) \rangle}{2t}, \quad t = \text{antal skridt}$$

Hvis man simulerer én partikel efter ovenstående metode, vil dette dog *ikke* gælde, idet størrelsen ikke konvergerer for t gående mod uendelig. Dette er i grunden banalt, da man ikke kan lave en ensemble-midling over én partikel.

JD fremhæver, at computersimuleringer er en meget effektiv måde, hvorpå man kan løse problemer, der ellers ville være meget vanskelige eller umulige at løse. Selvom man ofte arbejder med meget simple modeller, kan disse være umulige at løse analytisk uden at indføre

approximationer. Uden simulering er approximationerne problematiske, da det kan være svært at gennemskue konsekvenserne af dem.

Der er også eksempler på simple modeller/problemer, der er umulige at løse analytisk (f.eks. Ising-modellen i 3 dim.). I disse tilfælde er simulering et uvurderligt redskab til at vurdere modellens gyldighed.

Arbejdsmetode.

I perioder bruger JD det meste af sin tid på, at lave simuleringer. I andre simulerer han overhovedet ikke, hvorved der kan gå flere måneder, hvor han slet ikke bruger computeren til simulering. Dette kan hænge sammen med, at han ikke bevidst vælger emner, der er velegnede til simulering; på den anden side undgår han dem ikke, hvorfor computeren egentlig ikke har nogen indflydelse på, hvilke emner han vælger at beskæftige sig med.

JD tøver gerne med at gå igang med programmeringen, hvilket efter hans eget udsagn skyldes dette formodentlig, at han ikke er vokset op med computeren, hvorfor hans forhold til den er lidt ambivalent. På den ene side er han ikke meget for at påbegynde den evindelige søgen efter fejl i programmet, men på den anden side ved han, at simuleringer er til stor nytte i arbejdet, når programmeringsfasen er overstået. I simuleringsfasen betragter JD computeren som en samarbejdspartner - som han siger: "Det er ligesom at tale med en, der har forstand på det".

De programmer han laver, er korte (et par sider), da han ikke skal gøre noget for at andre skal kunne benytte dem - til gengæld er de meget beregningstunge.

Simulerings placering i arbejdet.

JD mener, at hans eget arbejde starter bekræftende, og siden evt. går over i en idéudviklende del. Dette skyldes formodentligt hans indstilling til simuleringer, nemlig at man skal have fuldstændigt styr på det man "putter ind i computeren", og som følge deraf have en klar ide om, hvad der skal komme ud af det.

Hvis resultatet imidlertid er forskelligt fra det forventede, hvilket ofte sker, er han pludselig (mere eller mindre frivilligt) havnet i en idéudviklende fase. Dette kan føre til, at en simple model viser sig, at være bedre end den først antagede, hvilket selvfølgelig bliver årsag til et anfald af spontan glæde.

Simulerings placering i fysikken.

JD mener ikke, at det giver mening at snakke om simuleringsfysikere, som en ny type fysikere. Hvis man kalder de fysikere, der anvender simulering for simuleringsfysikere, så er de teoretiske fysikere en uddøende race, og der vil om få år igen kun være to typer fysikere - og så kan vi lige så godt beholde de gamle betegnelser.

JD betragter simulering som et redskab, der overvejende bruges af teoretikere. Han udelukker dog ikke, at der kunne være andre former for simulering, som hovedsageligt anvendes af eksperimentalfysikere.

Indenfor de felter JD arbejder med (amorfe stoffers fysik) har simulering ikke betydet så meget, som man umiddelbart kunne forvente. Grunden til dette er nok, at området i høj grad domineres af eksperimentalfysikere.

Simulerings indflydelse på emnevalg.

Mulighederne for simulering af et problem har ingen indflydelse på, hvilke emner JD går i gang med at arbejde på. Der er dog mange ting i forbindelse med de emner, han har arbejdet med, som ville være interessante at simulere, men som han ikke har simuleret på grund af manglende computerkraft. Et eksempel på dette er simulering af elektrisk ledeevne i uordnede stoffer. Her er der opstillet en model, som er simuleret i 1 dimension. I 2 og 3 dimensioner har JD fundet en approksimativ løsning af modellen, som stemmer overens med eksperimentelle data. Det ville nu være naturligt at simulere modellen i 2 og 3 dimensioner, for at se hvor gode de anvendte approksimationer er, men her er det, at problemerne med manglende computerkraft kommer ind i billedet. Dette er altså et eksempel, hvor det ville være oplagt, at forsøge at anvende simulering bekræftende (men det kunne jo udvikle sig til noget idéudviklende).

Fremtiden.

Det er et ret generelt fænomen i fysikken, at man arbejder med logaritmiske tidsskalaer. Dette betyder, at man skal bruge en 10 gange hurtigere computer, for at komme én enhed ud af tidsaksen. Samtidig sker der det, at regnekraften af de hurtigste computere stiger eksponentielt, hvilket betyder at de hurtigste computere så at sige bevæger sig linært ud af den logaritmiske tidsskala. Dette får JD til at udtale "om 20 år kan vi løse alle vores problemer på computer" (men så finder vi nok på nogle nye!!!).

Vi præsenterede JD for Eigil Præstgaards syn på, hvad simulering dybest set går ud på: Man søger efter den simplest mulige model, der giver den/de makroskopiske effekter man undersøger. Man søger altså efter en kobling mellem de mikroskopiske egenskaber og de makroskopiske effekter. F.eks.: "Hvad er det egentlig, der giver faseovergangen i ferromagneter?".

JD tilsluttede sig fuldt ud dette synspunkt, og tilføjede at dette faktisk er selve kernen i teoretisk fysik!

Referat af interview med Niels Boye Olsen.

Jeppe Dyre anbefalede, at vi snakkede med Niels Boye Olsen: "Han er en af de meget få eksperimentalfysikere, der anvender simulering."

Uddannelse.

Niels Boye Olsen (Boye) er uddannet eksperimentalfysiker på KU, 1970. Han arbejder på IMFUFA, i nært samarbejde med Tage Christensen, med at fastlægge amorfe og underafkølede stoffers egenskaber.

Brug af simulering.

Boye gjorde under interviewet meget ud af, at understrege at han er "amatør" på simuleringsområdet. Det vil sige, at han anvender simulering på en indirekte måde i sit forskningsarbejde; han producerer ikke videnskabelige resultater med simulering. Derimod anvender han simulering som et værktøj til at opnå en kvalitativ forståelse af fænomener, som han støder på i sit arbejde.

Da Boye, som han selv siger, "forstår tingene meget konkret", er simulering et meget effektivt værktøj for ham, da det fungerer som et bindeled mellem det konkrete og det abstrakte.

Når Boye går i gang med at lave en simulering, er det ikke fordi han står med et konkret problem i forbindelse med sin forskning, som han skal have løst. Det er nærmere sådan, at han i forbindelse med sin forskning støder på et fænomen, som han får lyst til at "lege" med; altså at, for at opnå en bedre forståelse af hvad det er, der foregår, simulere fænomenet. Denne anvendelse af simulering kalder Boye selv, meget betegnende, for "selvundervisning".

Udførte simuleringer.

De første simuleringer Boye udførte, var på den VIC-20, som han købte i '82 eller '83. En af de ting han simulerede var hopmodeller, som model af diffusion; altså en Monte Carlo-simulering. Ellers har Boye mest anvendt Molecular Dynamics. Han har f.eks. anvendt Molecular Dynamics til at simulere dannelsen af gitterstrukturer i et system bestående af partikler med et Lennard-Jones potentiale. Han simulerede gitterdannelsen ved at indføre en gnidning, således at han kunne sænke energien (og temperaturen) i systemet. Når energien bliver tilstrækkelig lav i sådant et system, bliver der nemlig dannet et gitter, idet systemet finder minimumet for den frie energi. Det spændende var, at der under visse betingelser skete det, at systemet blev fanget i lokale minima - dvs. at det dannede gitre, som ikke ses i virkeligheden.

Perspektivet i denne simulering er, at undersøge om man kan finde en dynamik, der beskriver hvordan systemet som helhed hopper rundt mellem de lokale (og det globale) minima. En sådan beskrivelse af systemet ville være enorm praktisk, ligesom det er enormt praktisk med en termodynamisk beskrivelse af en gas.

Ovenstående skal ikke forstås sådan, at det var formålet med simuleringen at finde denne dynamik; at finde dynamiken er et langtsigtet mål med Boyes arbejde.

Den metode Boye anvender ved Molecular Dynamics-simulering, er ikke helt magen til den,

de "professionelle" anvender. Et eksempel på dette er, at Boye ikke anvender periodiske randbetingelser – dem har han en hvis mistro til, da han mener de er "unaturlige". Man kan sige, at Boye simulerer systemerne "som de er". Et andet eksempel på dette er, at han ikke eksperimenterer med potentialet, som f.eks. Eigil Præstgaard gør det.

Sammenfattende kan man sige, at Boye ikke eksperimenterer med de fysiske love, som definerer vekselvirkningerne mellem partiklerne. Det, som han eksperimenterer med er, hvordan et givet system under forskellige betingelser udviser et bestemt strukturelt eller dynamisk fænomen.

Tid brugt på simulering.

Boye anvender generelt ikke meget tid på simulering, og der kan gå meget lang tid mellem de perioder, hvor han simulerer. Da vi snakkede med ham, var det f.eks. et par år siden, at han havde været i gang med at simulere sidst (efter interviewet er han dog gået i gang igen).

Andre anvendelser af computeren.

Boye anvender, udover simulering, specielt computeren til numerisk løsning af differentiaalligninger, forsøgsstyring, dataopsamling og databehandling. Specielt forsøgsstyring og dataopsamling har **meget** stor betydning for det eksperimentelle arbejde; eksperimenterne kan f.eks sættes op til at køre automatisk natten over.

Fremtiden.

De systemer Boye arbejder med, er præget af meget lange relaksationstider – dvs. at de karakteristiske tider på det makroskopiske plan er mange størrelsesordener større end på det mikroskopiske plan. Dette betyder, at simulering af disse systemer kræver så stor en regnekraft, at selv de hurtigste computere idag ikke kan opnå resultater, der kan sammenlignes med eksperimenter. På den anden side betyder det, at Boye ser optimistisk på, hvad fremtiden (og de hurtigere computere) vil bringe; der vil komme mange interessante resultater, som følge af simulering, indenfor området amorfe/underafkølede stoffer.

Referat af interview med Tomas Bohr og Mogens Høgh Jensen.

Uddannelse.

Tomas Bohr (TB): Uddannet 1980 i fysik og matematik, begyndte i 1983 at arbejde med computere i samarbejde med Mogens Høgh Jensen (MHJ) og Peder Voetmann. Har arbejdet med computere siden. Ansat på Niels Bohr instituttet.

Mogens Høgh Jensen: Uddannet 1981 i fysik og matematik, lavede speciale om kritiske fænomener, uden at han brugte computer. Begyndte at arbejde med computere i 1982 på DTH og har arbejdet med dem siden. Ansat på Nordita.

Arbejdsmetode.

TB og MHJ arbejder ofte sammen om deres projekter, og de bruger computere på den samme måde i deres arbejde. De arbejder begge indenfor kaosområdet og prøver at forstå kaotiske fænomener som turbulens.

Deres arbejde med computere er en vekselvirkning mellem at ideudvikle og efterprøve egne modeller.

De benytter computeren til numerisk løsning af differens- og differential- ligninger, og til at lave komplicerede matematiske operationer såsom at invertere matricer.

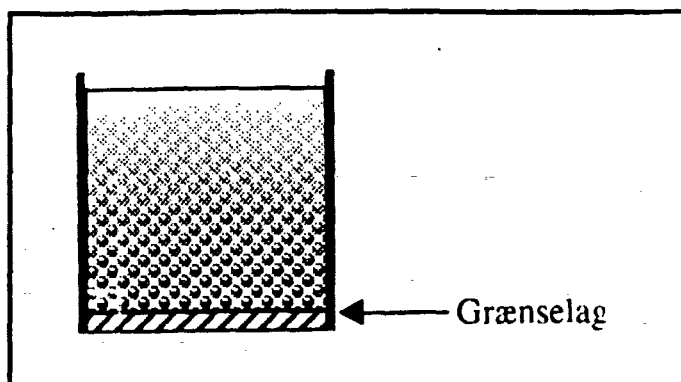
De opstiller simple modeller af fysiske fænomener, og bruger computeren til at visualisere modellens opførsel ved, på skærmen, at plote de i modellen vigtige størrelses udvikling i tiden - f.eks. som et faserumsplot. Da de let er i stand til at ændre parametrene i modellen, kan de umiddelbart på skærmen se, hvilke konsekvenser en bestemt påvirkning af modellen får for den tidlige udvikling. Altså kan de indgå i en meget aktiv "dialog" med computeren, som kan give dem en viden om modellen, der ville være umulig at opnå uden computeren.

Et eksempel på dette er MHJ's simulering af turbulens i form af udsendelsen af varme "bobler" eller paddehatte fra grænselaget i en gryde fuld af vand, der opvarmes nedefra. Se figur A.2. I grænselaget er temperaturgradienten meget stor. Vha. eksperimenter har man konstateret, at grænselaget ind imellem udstøder paddehattelignende klumper af varmt vand. Dette fænomen skyldes vekselvirkningen mellem konvektion og diffusion i gryden, men er vist nok ikke særlig godt forstået.

MHJ startede næsten i blinde, da han satte sig for at simulere dette fænomen, og byggede dernæst modellen op ved at kigge på skærmen og herudfra ændre på modellen, indtil han havde noget, der fremviste samme kvalitative opførsel som virkelighedens vandgryde-systemer, og til en vis grad samme kvantitative opførsel. Den fremkomne model var dog ikke helt fysisk realistisk, idet den f.eks. ikke overholdt nogle bevarelseslove, som man erfaringsmæssigt ved, sådanne systemer overholder. Men da han ændrede modellen for at gøre den mere realistisk, blev den så kompliceret, at det tog for lang tid at gennemregne den.

En af deres andre modeller er til simulering af turbulens. Den består af en masse koblede drevne penduler, f.eks. 100. Hvert enkelt pendul er i stand til at fremvise kaos i tid. Ved at

starte de 100 penduler sådan at f.eks. hvert andet er kaotisk, kan det iagttages, hvordan kaos'en breder sig ud i systemet. Hele systemet kan altså fremvise både tidslig og rumlig kaos, hvilket karakteriserer turbulens. Ud af modellen har de bla. prøvet at finde sammenhænge mellem størrelser, der karakteriserer både tidslig og rumlig kaos.



Figur A.2. Gryde der opvarmes nedefra.

Også denne model har de tilstræbt at gøre så simpel som mulig, hvilket er et generelt træk ved deres arbejdsmetode. Begrundelsen for, at de foretrækker at opstille simple modeller, ligger i, at de prøver at forstå meget ikke-lineære og komplicerede fænomener – såsom forskellige former for stærk turbulens. Grundligningerne for turbulens er allerede kendt (Navier-Stokes ligningerne), men de er ikke særligt brugbare at simulere. Dette skyldes, at outputtet fra en simulering af disse ligninger ret hurtigt bliver meget uoverskueligt og i praksis umuligt at fortolke, efterhånden som man bevæger sig ind i det turbulente område.

En anden angrebsvinkel består i at opstille en meget simpel model, der, når den simuleres, kan udvise samme kvalitative opførsel, som det fænomen, der forsøges modelleret. Outputtet fra en sådan simulering vil være muligt at fortolke, og hvis simuleringen udviser den rigtige opførsel, har man måske fået isoleret de fysisk vigtigste parametre i sin model, og dermed fundet den fysiske kerne i fænomenet. Til gengæld må man acceptere, at de simple modeller ikke er fysisk korrekte, idet man, hvis man prøver at implementere bevarelseslovene i sin model, kommer frem til grundligningerne (Navier-Stokes ligningerne og andre), hvorefter man er tilbage ved udgangspunktet.

En anden begrundelse for at opstille og simulere simple modeller ligger i, at de dermed har mulighed for at regne på større systemer og længere tider. Endvidere er en simpel model med få parametre mere gennemskuelig, end en mere kompliceret er det. Dette er en værdifuld egenskab ved en model, idet de har set eksempler på simulering af modeller, der var så komplicerede, at resultatet af simuleringen blev meget svært at fortolke, og muligheden for at kunne reproducere simuleringen derfor var lille. Et fortolkningsproblem kan f.eks. være: "Er det pga. at de har stillet alle parametrene på en helt bestemt måde, at resultatet er fremkommet, eller er det et mere grundlæggende træk i modellen". I en simpel model vil man derimod kunne argumentere for at have fundet frem til de grundlæggende årsager bag et simuleret fænomen, netop fordi modellen er meget forsimplet, men stadigvæk fremviser den korrekte kvalitative opførsel.

TB og MHJ simulerer kun simple modeller, da de mener at man ikke får nogen ny viden ud af at arbejde med store og uigennemskuelige modeller.

De arbejder udelukkende med teoretiske problemer, hvilket langt de fleste gør på deres felt. De mener det dels skyldes at det kræver større arbejde og flere penge at lave et eksperiment, men også at fysik bygger meget på traditioner – og det tager lang tid at skabe en tradition for at lave eksperimenter.

Det er sjældent, at de ser helt uventede ting fra en computersimulering, da de altid har en idé om, hvad der vil komme frem. Tomas nævnte dog, at han havde simuleret en model af kemisk turbulens, hvorved der var fremkommet bundne tilstande af spiralbølger, hvilket var helt uventet og stadigvæk er teoretisk uafklaret. Det er dog tit sådan at deres forestillinger om resultaterne ikke stemmer nøjagtigt overens med de faktiske resultater. At resultaterne ikke stemmer overens med det forventede, betyder tit at man lærer noget nyt, hvorudfra man kan arbejde videre med sin model, så den kommer til at passe bedre.

Det er dog ikke altid at en af deres simuleringer frembringer ny viden. Nogle gange laver de bare et eller andet fordi de syntes det er sjovt, hvilket faktisk er den drivende kraft i deres arbejde.

Problemer ved at bruge computere.

De mener, at der er en fare ved at bruge computere, i form af, at man fristes til ikke at tænke sig om, men det er ikke noget væsentligt problem, da der ikke kommer nogle væsentlige resultater ud af denne fremgangsmåde.

De har indtryk af, at de resultater, som er vigtige og vækker opsigt, i stor udstrækning bliver tjekket af andre forskere rundt omkring i verden.

Russerne har været hæmmet af ikke at have computere i særligt stor udstrækning, hvilket har betydet, at de er blevet meget dygtige til at løse problemer på den gammeldags måde ved at løse dem analytisk, men de er bange for at kaste sig ud på dybt vand og give sig kast med noget helt nyt, hvor der ikke er noget velfunderet teorigrundlag, som det f.eks. var tilfældet med kaos i dets begyndelse.

Udviklingen af brugen af computere.

Opfattelsen af computere har ændret sig på den måde, at det før i tiden var dyrt at bruge computere – samtidig med at computer budgetterne på de enkelte institutter ikke var ret store. I dag er der langt større forståelse for at computeren er en vigtig del af ethvert forskningsprojekt, hvorfor budgetterne bliver større, og prisen på regnetid er faldet drastisk. Ydermere er det i dag meget almindeligt, at folk har deres egen meget kraftige workstation stående; og så er regnetiden jo gratis, når først maskinen er betalt.

De mener at kaos, og meget andet af det de laver, er meget afhængigt af computere og ville nok ikke være blevet opdaget, hvis det ikke havde været for computeren skyld. Det er dog vigtigt at bemærke, at udviklingen indenfor disse felter ikke hænger på kraftige computere. Eksemplet er Feigenbaum, som brugte en programmerbar lommeregner. Godt nok bruger TB og MHJ kraftige computere, men det er først for nylig, at de er begyndt at bruge supercomputere (UNI●C's CM-200).

De mener i øvrigt at computere burde bruges meget mere i fysikundervisningen, da de kunne give en interaktiv indlæringsform, som ville være meget gavnlig. De har selv afholdt et kaos-kursus, hvor de brugte computere som supplement til resten af undervisningen.

Krav til computeren: Tomas nævnte, at det er en stor fordel, hvis computeren har biblioteks-sprog indeholdende f.eks. forskellige numeriske metoder til løsning af differentiallyigninger, sådan at man ubesværet kan tjekke, at ens resultater ikke er afhængige af simuleringsmetoden.

Fremtiden.

Fremtiden indenfor simulering vil formentligt bringe en stor udvikling indenfor den biologiske fysik – dvs. proteinstrukturer og deres foldning samt selvorganisering. Dette vil betyde, at man vil begynde at bruge meget store og komplekse modeller til at udregne helt specifikke værdier og former, som kan anvendes inden for f.eks industrien og forskningen i de enkelte stoffer. Denne udvikling vil kræve ekstremt hurtige computere.

Adspurgt om, hvad de mener er vejen frem indenfor deres forsknings område, nævnte de bla. fig.: At udvikle simple modeller, der viser noget interessant og at finde scalinglove.



"Mr. Osborne, may I be excused? My brain is full."

Referat af interview med Benny Lautrup.

Foretaget kl.10-12, tirsdag d.25/2.

Uddannelse.

Benny Lautrup (BL) blev færdiguddannet magister i fysik i 1965 og er teoretisk fysiker. Han har altid været meget interesseret i computere, og var efter eget udsagn nok blevet datalog, hvis han havde været 10 år yngre.

Den historiske udvikling.

Et afgørende skridt, mod computeren som egentligt simuleringsredskab, kom i 1975 da Wilson udviklede Gitterfeltteorien (Lattice field theory) ud fra kvantefeltsligningerne. Wilson kunne, ved at have Gauge-invarians på sit gitter og ved at tilføje imaginær tid som en ekstra dimension, få kvantefeltsligningerne til at blive klassisk modelerbare. Resultatet var at 3-dimensional statistisk kvantemekanik blev transformeret til 4-dimensional klassisk-statistisk mekanik, der kunne implementeres på computer.

I 1980, da supercomputerne efterhånden havde opnået en rimelig hastighed, udførte Kreutz den første simulering af feltteorien. BL lavede også i 1980 en større simulering af det samme - hans egen første og efter eget udsagn en af de første "store" simuleringer overhovedet indenfor dette område.

Gitterfeltteorien har haft stor betydning for udviklingen af supercomputere i USA, idet simuleringer indenfor dette område kræver et enormt regnearbejde. Der bliver ikke, i øjeblikket, udviklet supercomputere i Europa.

Forskerne benyttede og benytter stadig store supercomputercentraler. I midten af 80'erne, blev det muligt for forskere også at foretage simuleringer på egne små computere, de såkaldte workstations.

BL's arbejde med computere.

BL fattede selv interesse for computere i 1960, da han som studerende hørte et foredrag, af Peter Nauer, om programmeringssproget ALGOL. Han så en computer for første gang i 1967 (Brookhaven, USA). Frem til 1980 brugte han computere som numeriske integratorer og symbol-manipulatorer.

I 1980 udførte BL, som nævnt tidligere, sin første simulering på en af datidens supercomputere. Han har siden da og frem til i dag udført adskillige simuleringer på supercomputere. Af nyere projekter kan nævnes neurale netværk, som han har beskæftiget sig med siden 1987. Et neuralt netværk, opfattet som en simuleringsmetode, kan sammenlignes med simuleret annealing og Monte Carlo.

BL har siden 1984 også benyttet forskellige workstations til sine simuleringer.

Tid foran computeren.

BL veksler mellem i lange perioder ikke at simulere - for så i andre perioder ikke lave andet.

Computerens indflydelse på fysikken.

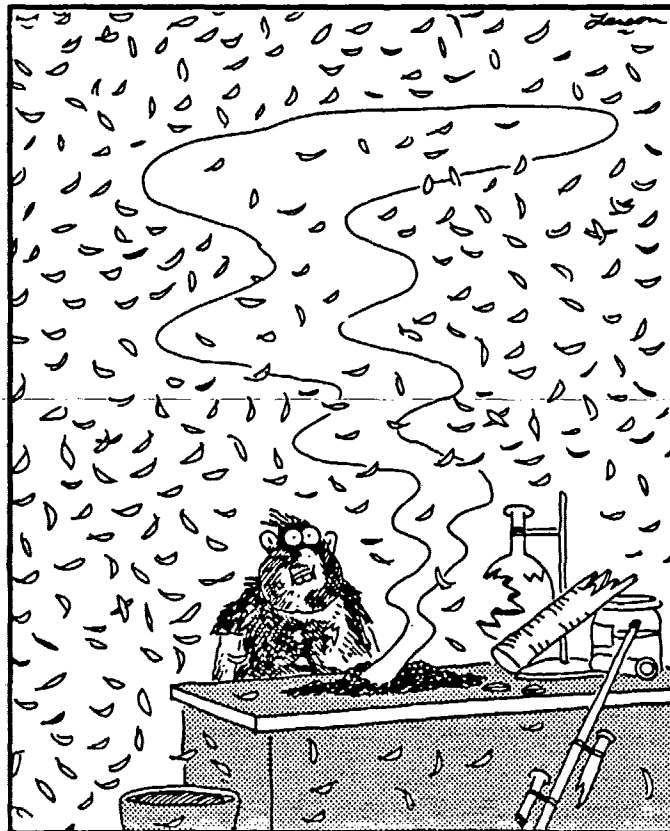
Computeren er nu blevet et grundlag for fysikken. Den har udvidet fysikken på mange områder, specielt med den nye gren indenfor fysik – komplekse systemer, der efter BL's mening er et resultat af, at computeren har givet naturvidenskabsfolk fra mange forskellige fagområder et fælles grundlag. Der er med de komplekse systemer skabt en integration mellem de traditionelle fag. Computersimulationer har medført at fysikken har fået en øget rolle indenfor f.eks. kemi, idet vekselvirkningerne mellem atomer og molekyler bliver forklaret af fysikken, og det er disse vekselvirkninger som ofte bliver simuleret. Fysikken har altså bredt sig og blandet sig med andre fagområder, og det er dermed også blevet mere uklart, hvor grænserne mellem fysik og andre områder ligger. Computeren har bidraget til, at man er begyndt at kunne interessere sig for globale egenskaber ved større makroskopiske systemer.

Fremtidens simulering.

BL kan ikke forestille sig, at computeren ikke skulle kunne skabe nye discipliner indenfor fysikken – men som han siger, hvis han vidste hvilke discipliner, ville han smide alt, hvad han havde i hænderne, og gå i gang.

Der er ingen tvivl om, mener BL, at fremtiden ligger gemt i supercomputere. I disse EF tider vil der blive postet millioner og atter millioner i projekter til udvikling af supercomputere (TeraFlop-maskiner).

Disse supercomputere vil i overvejende grad vil blive brugt til computersimulationer indenfor kvantekemi, meteorologi, hydrodynamik, neurale netværk samt undersøgelse af proteiner og DNA. Det sidste lader til at være et meget hot emne.



God as a kid tries to make a chicken in his room.

Referat af interview med Ole Holm Nielsen.

Uddannelse.

Lic. scient i 1982, fra Århus Universitet, i teoretisk fysik.

Laboratoriet for Teknisk Fysik.

Ole Holm Nielsen (OHN) var indtil fornylig lektor ved Laboratoriet for Teknisk Fysik (LTF) ved DTH. Målet med hans arbejde har været, at finde frem til makroskopiske egenskaber for forskellige stoffer, bla. kobber. Til dette har han anvendt Molecular Dynamics, som han har en forholdsvis bred definition af, da den også inkluderer kvantemekanik. Da man mener, at forstå de simple systemer (enkelt atom, uendelig fast krystal) ned til stor detalje, arbejder OHN med at forstå mere og mere komplekse systemer.

Fra 1920-1960 fik man god fod på et enkelt atom, hvorefter man i 70'erne og 80'erne kunne gå videre til at behandle krystaller analytisk og numerisk, hvilket LTF har været meget involveret i. Man startede med at se på et uendeligt krystal (periodiske randbetingelser), men senere begyndte man at se på et krystal med en overflade, som tilføres et molekyle, der reagerer med krystallet.

Et system kan beskrives på flere forskellige måder - f.eks. kan en gas beskrives ved termodynamisk-, en molekyle- eller en kvantemekanisk- model. OHN har arbejdet med at teste overgangene mellem de enkelte modeller.

OHN er i dag ansat hos UNI•C, som videnskabelig konsulent, hvilket vil sige, at han vejleder forskningsgrupper i anvendelsen af den ny-indkøbte parallelle computer CM-200, og deltager i forsknings-samarbejde med enkelte forskningsgrupper, som f.eks LTF.

Simuleringsmetode.

Med hensyn til valget af simuleringsmetode mener OHN, at hvis man ønsker at følge et systems tidslige udvikling, er det naturligt at bruge Molecular Dynamics, da man med Monte Carlo laver en masse unødigt regnearbejde. Det er således OHN's erfaring, at Monte Carlo er væsentligt langsommere end Molecular Dynamics, med hensyn til de systemer han arbejder med.

Parallele computere.

Den regnekraft, der er til rådighed, har en stor indflydelse på OHN's arbejde, da det som sagt drejer sig om komplekse systemer. Derudover er det vigtigt, at man kan simulere mange partikler, da det ofte er termodynamiske størrelser, man undersøger. Dette var baggrunden for, at LTF i foråret 91 var med til at danne CAP (Center for Anvendelse af Paralleldatamater). Deltagerne i CAP er:

- UNI•C
- DTH
 - Numerisk Institut
 - Institut for Matematisk Statistik og Operationsanalyse.
 - Laboratoriet for Teknisk Fysik
 - Afdelingen for Fluid Mekanik

- KU
 - Datalogis Institut
 - Astronomisk Observatorium
- Niels Bohr instituttet og NORDITA

Den første parallelle computer CAP anskaffede var en Connection Machine CM-2 (senere udvidet til en CM-200). CM-200 er en parallel computer med 8196 processorer, og den er i dag (da vi var på UNI●C) Danmarks hurtigste computer. Hvis opgaven egner sig til at blive udført på en parallel computer, er CM-200 ca. 10-15 gange hurtigere end Danmarks hidtil hurtigste computer (Amdahl vektorprocessor (CM-200 er desuden billigere!)).

Det er ofte et problem at udnytte en parallel computer optimalt, dvs. distribuere sit problem ud over alle computerens processorer. Parallelle computere er velegnede til at regne på systemer, der har mange ens dele. Et eksempel kunne være Molecular Dynamics, som ville være et naturligt problem at parallelisere, da der er en masse molekyler, som man skal udregne sted- og hastigheds- koordinater ud for. Dette betyder, at OHN (og LTF) effektivt har fået 10-15 gange mere regnekraft til den type problemer de regner på, hvilket har givet et stort spring i, hvilke opgaver de kan udføre.

Med hurtigere computere kan man simulere mere komplekse systemer, f.eks systemer med mange partikler. Da man regner med, at man nærmer sig den termodynamiske grænse asymptotisk ved at forøge antallet af partikler, kan man på den måde komme tættere på denne grænse, hvor man kan begynde at sammenligne de makroskopiske resultater af simuleringerne med de makroskopiske størrelser, som man måler i laboratoriet. Det er simuleringer, som stræber mod denne grænse, der laves på LTF, med det formål at få noget at vide om materialers egenskaber, dvs. varmeledning, smeltepunkt, osv. Computeren er et værktøj, der bringer os til en forståelse af stadig mere komplekse systemer, og giver muligheder for at udføre eksperimenter, som man ellers kun vanskeligt eller slet ikke kan lave i laboratoriet, hvilket er den basale grund til, at computer-simuleringer er interessante.

Blandt de simuleringer, der har været mulige at lave grundet CM-200, er simulering af overfladesmeltning af metaller, sintring¹ af metaller og stoffers elastiske egenskaber.

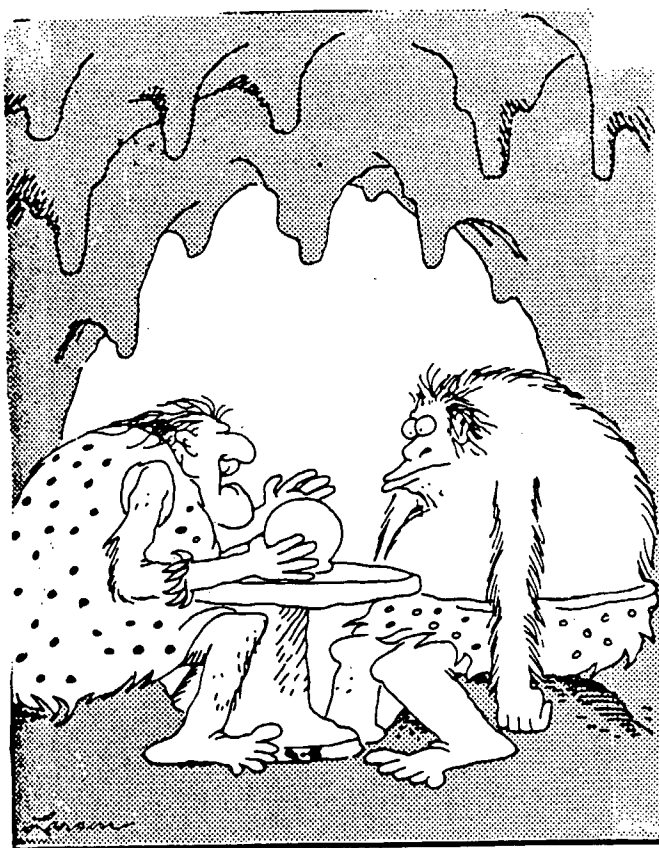
OHN mener ikke at det er sværere at programmere parallelt, end det er at programmere en seriel computer. Faktisk mener han, at det er nemmere at programmere parallelt, da man kan sige "Alle atomer: gør "dit-dat"", i stedet for at skulle lave en masse løkker. Der ligger derimod et meget stort forskningsarbejde i at udvikle parallelle algoritmer, som er grundlaget for at udnytte parallelle computere. Når man først har algoritmerne, er det ikke svært at programmere en parallel computer.

Fremtidsperspektiver.

OHN regner med, at man om 10 år har 100-doblet supercomputernes regnekraft, hvilket betyder at man kan regne på 100 gange mere komplekse systemer. Ligeledes konstaterede han, at den historiske udvikling (som forventes at fortsætte en del år endnu), for RAM memory på

¹En måde hvorpå man ved højt tryk og temperatur får mikrokrystallerne i et pulver til at hænge sammen, i modsætning til en smeltning, hvor pulveret omdannes til en stor krystal.

samme chip areal, vokser med en faktor 4 hvert andet år.



"I see your little, petrified skull ... labeled and resting on a shelf somewhere."

Referat af interview med Åke Nordlund.

Uddannelse.

Åke Nordlund blev uddannet i teoretisk fysik i Uppsala, men tog sin PhD-grad indenfor et andet område, nemlig astrofysik (i 1976). Dette arbejde lavede han bla. på NORDITA, hvortil han kom i 1975. Han arbejdede der i tre år, men er nu ansat på Astronomisk Observatorium under KU.

ÅN tog, under sin kandidat uddannelse, kurser i numerisk databehandling. Disse kurser beskæftigede sig med numeriske metoder på computer ud fra en fysikers behov, hvilket ikke er det samme som en matematikers eller en datalogs behov. Et sådant kursus mener ÅN er en naturlig og nødvendig del af et fysikstudium, da computerberegninger er et redskab på linie med matematisk analyse. Han har selv startet et kursus på KU's fysikuddannelse med dette formål, da et sådant kursus ikke eksisterer andre steder på KU. Det ideelle ville dog være, at man havde et institut, der beskæftigede sig med emnet.

Formål med simuleringer.

Et mål med astronomisk forskning er at få kendskab til mælkevejens kemiske sammensætning. For at sammenkæde en stjernes spektrallinier med dens fundamentale parametre, massen, luminositeten og den kemisk sammensætning, kan man lave simuleringer. ÅN arbejder bla. med at lave modeller af det yderste konvektive lag af stjerner. Konvektion er varmetransport ved gasbevægelser, i stedet for ved stråling. Det bevirker, at materiale ved stjernens overflade sættes i kompliceret bevægelse, hvilket spiller en stor rolle for spektralliniene. Modellen er en gittermodel, med partielle differentialligninger. I en stjerne, som jo består af elektrisk ledende plasma, vil man have 8 variable for hver gitterpunkt - disse er tæthed, temperatur, hastighed (3dim) og magnetfeltet (3dim).

Simuleringernes placering i arbejdet.

ÅN havde svært ved at opdele sine simuleringer i ideudviklende og bekræftende, de er begge dele, og virkeligheden er for kompleks til, at kunne opdeles på den måde. Han opdelte selv sit arbejde i 4 (5) faser. Først kommer en fase hvor man danner sig et ideemæssigt billede af hvad der sker, hvorefter man beskriver man det matematisk (i algoritmer). Herefter kommer simuleringssfasen, hvor man får modellen implementeret og modtager resultaterne, og til sidst kommer en fase hvor man behandler resultaterne og skriver artikler. Efter dette er der på en måde en 5. fase, hvor man forsøger at overbevise folk om, at det man laver, er interessant nok til, at der skal pumpes penge i et nyt projekt, man vil i gang med.

ÅN begyndte meget tidligt at lave simuleringer af 3-dimensionale modeller af solen (75 - 76). Man kunne på en "main frame" simulere et gitter på $16 \cdot 16 \cdot 16$ og få resultater, der kunne vurderes kvalitativt i forhold til observationer. På dette tidspunkt var det mere normalt at simulere 2-dimensionale modeller. Grunden til at ÅN valgte at simulere i 3 dimensioner, var at han er af den opfattelse, at virkeligheden simuleres i 3 dimensioner, og da et projekt altid tager længere tid, end man regner med, kunne han forudse, at han ellers 10 år senere stadig ville simulere i 2 dimensioner, skønt computerne var blevet større.

Computere.

Medens ÅN var på NORDITA fik han cpu-tid på en Cray i England, hvilket betød at han

kunne regne på et større system, hvorfor resultaterne blev mere interessante sammenlignet med observationerne.

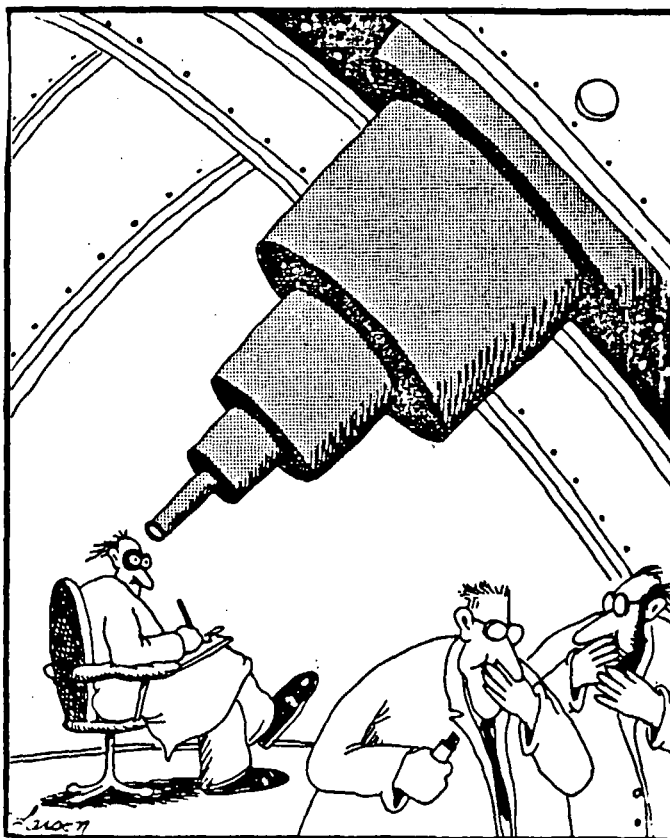
I '82 fik han cpu-tid på en Alliant i Colorado. De resultater han fik ud af dette, kunne sammenlignes direkte med eksperimentelle måleresultater, hvilket han mener er meget vigtigt, fordi de eksperimentelle måleresultater ikke alene kan give en detaljeret forståelse af stjernerens indre dynamik. Computermodeller er den bedste mulighed man har for, at skaffe sig en sådan kvalitativ forståelse.

I dag har man modeller, der stemmer forbløffende godt overens med observationer af solen – disse modeller kan så bruges til at simulere stjerner med egenskaber tæt på solens (små ændringer i masse og temperatur), hvormed man kan danne sig et billede af, hvordan andre typer af stjerner ser ud.

Når man skal lave så beregningstunge udregninger, som ÅN foretager, er det et problem at få computertid. Han har fået 1000 timer cpu-tid på en Cray 2, hvilket er meget heldigt. På denne maskine kører hans programmer 80-100 MegaFlop. På UNI-C's nye CM-200 vil han kunne bruge flere timer ved en hastighed af ca. 350 MegaFlop. Grunden til at hans programmer vil køre så hurtigt på CM-200, er at modellen er velegnet til parallel databehandling.

Fremtiden.

ÅN mener så absolut at parallelle computere er fremtiden, da disse kan gøres hurtigere ved at anvende flere processorer – hvormod man med vektor-computere snart vil nå loftet.



Referat af interview med Søren Toxværd.

Uddannelse.

Søren Toxværd (ST) er uddannet på HCØ i teoretisk kemi, og blev færdig i 1966. Som teoretisk kemiker har han et stort kendskab til statistisk mekanik. I studiet indgik ikke computere, men ST begyndte at simulere i midten af 60'erne.

Han benyttede computeren, som stod i kælderen i matematisk bygning. Dette var "Gier" (Geodætisk instituts elektroniske regnemaskine), og den skulle programmeres med strimler. ST udtalte, at på dette tidspunkt var det ikke muligt at simulere i Danmark, men han gjorde det alligevel. På "Gier" maskinen kunne man lave gittersimuleringer, hvilket ST også har beskæftiget sig med, men ellers har han mest brugt MD.

Brug af computeren.

I starten benyttede ST Algol, men senere erfarede han, at han kunne vinde en faktor 2 i beregningstid ved at skifte til Fortran, hvorfor han benytter dette sprog idag. Med dette sprog har ST bla. simuleret på UNI●C's Amdahl, og på NOVO's computer. Dette er stærke vektorcomputere, og ST er en storbruger af beregningstid.

Til sit seneste arbejde har han brugt over 500 Amdahltimer, men han har stadig brug for flere. For at opnå større beregningstid har ST snust til UNI●C's parallelle computer "CM-200". Han har brugt flere måneder på at implimentere en model specielt egnet til parallel programmering, men det lykkedes ikke. Problemet var at undgå flaskehalse mellem de 266 cpu'er.

Der er også et andet problem ved programmering af parallelle maskiner. Maskinerne er opbygget forskelligt, og skal derfor programmeres forskelligt, hvilket betyder, at har man lært at benytte CM-2, skal man ikke tro, at man umiddelbart kan programmere alle andre parallelle maskiner. Det er et problem, at man som forsker bliver tvunget til at bruge tid på rent datalogiske problemer, som at omstille sig til en ny programmeringsmetode. På grund af disse problemer vil fremtidens simulering blive et Teamwork mellem programører og forskere.

ST kan ikke give et tal på, hvor lang tid han bruger foran computeren, men tendensen er, at han fungerer mere som rådgiver, hvor han selv diskuterer problemer ved tavlen, i stedet for at sidde ved computeren.

ST mener, at computeren er et redskab til at bekræfte ens ideer. Når han sidder ved computeren, har han altid en klar ide om, hvad han skal lave. Han leger ikke ved computeren, og har ikke opnået resultater eller fået ideer ved at arbejde i blinde. Men selvfølgelig har han fået overraskende resultater fra sine simuleringer; hvis man kendte resultatet på forhånd, ville det jo ikke være nødvendigt at simulere.

Simuleringsmetode.

ST arbejder med Molecular Dynamics-modeller, som han karakteriserer som simuleringer, der har et tidsligt forløb og som benytter Newtons bevægelsesligninger eller kvantemekaniske ligninger. Statistiske modeller er ikke så spændende, fordi de begrænser sig til ligevægtssystemer og udregning af middeltal. Med Molecular Dynamics ser man også molekylernes bevægelser og den tidlige udvikling.

Beregningstiden i de to slags simuleringer er svær at sammenligne, da de beskæftiger sig med forskellige ting. Monte Carlo kan godt tage lang tid, hvis man bliver fanget i en lomme i faserummet.

Det er vigtigt, at man benytter den rigtige integrationsmetode. En integrationsmetode kan være mere eller mindre god til at udregne en baneurve, men det er vigtigere, at den opfylder de fundamentale krav i fysikken. Runge-kutta integrationsmetoden er asymmetrisk i tiden. Metoden er god til at løse et analytisk problem, som f.eks. en rakets vej mod månen, men hvis ST brugte metoden, ville det være en katastrofe, fordi den ikke bevarer reversibiliteten i Newtons mekanik. Eller sagt på en anden måde – det er vigtigere at opfylde et fundamentalt fysisk krav, end at løse en trajektorie, som man alligevel ikke kan løse, når ens system er kaotisk. Dette hænger sammen med, at man i simulering søger kvalitative resultater frem for kvantitative.

Simuleringens rolle i historien.

Oprindeligt var simulering slet ikke accepteret. Man syntes, det var en uartighed eller bare et legetøj. Man mente stadig som Galillei, at man enten skal måle eller gøre måleligt – simulering var noget pjat.

Simulering blev accepteret i takt med, at metoden udviklede sig, hvilket i al sin væsentlighed var en kontinuert process, hvorved det er svært at sætte fingeren på milepæle i simuleringens historie.

Computerens udvikling er ikke bare kontinuert, den er også eksponentiel mht. regnekraft. Men indtil for 5 år siden mærkede mange forskere ikke noget til dette, fordi antallet af forskere, der simulerer, ligeledes stiger eksponentielt, hvorved der er flere til at dele kagen.

ST mener selv, at computeren med tiden vil kunne træffe valg, og på anden måde komme til at ligne en menneskelig hjerne, det er bare et spørgsmål om regnekraft og parametrisering. ST nævnte, at han og en ven i tidernes morgen havde diskuteret, om computeren ville kunne slå en menneskelig skakspiller i skak. ST mente, det var et spørgsmål om regnekraft, hvilket har vist sig at være rigtigt. Han mener således, at analogien til den menneskelige hjerne holder. Hvis intelligens og intuition kan parametriseres, og det mener han, at de kan, vil computeren med tiden få disse egenskaber.

Appendix B.

QUESTIONNAIRE ON THE SCIENTIST'S USE OF DIGITAL COMPUTERS.

- 1a. field of research (e.g. molecular biology, organic chemistry, etc.)
b. field of graduate study if different from above
2. Approximate age
- 3a. How much of your research time do you spend making use of computers ?
 none less than 10% about 25%
 about 50% 75% or more
- b. Do you find this time increasing or decreasing ?
 increasing remaining about constant decreasing
- 4a. Do you know how to program computers ?
b. If not, do you feel you will have to learn ?
c. Do you or will you, require your students to learn ?
 yes no some of them
5. In your field, do you think that the role of computers will increase more rapidly than in other fields.
 will move more rapidly
 will keep pace with science in general
 will grow at a slower pace than in other fields
6. Certain areas in your field have profited more from the use of computers than other areas. Do you find your interests growing more toward or away from these computer-aided studies ?
 toward computer-aided areas
 not relevant
 away from computer-aided areas
7. We have all seen situations where having access to a computer had effect of making a man's thinking sloppy. Are people outgrowing this, or is this trend continuing ?
 outgrowing continued danger
8. Putting aside for the moment questions of research efficiency and effectiveness, do you "aesthetically" prefer the pre-computer era of science ?
 no
 I have no aesthetic reaction
 yes

9.a In your reading of the scientific literature in your field you have probably noticed an increasing in the number of papers on computer-related topics. Do you find yourself reading these papers ?

yes less than the others

b. Do you find these papers technically on a par with the other papers ?

yes, generally no

10. I would appreciate any further comments you might care to make.



Testing whether fish have feelings

Appendix C.

Ising-modellen samt Monte Carlo.

Ising-modellen.

Der kan i naturen observeres stoffer, der er ferromagnetiske. Det betyder at stoffet er permanent magnetiseret, dvs. at de magnetiske dipolmomenter fra atomerne har en tilbøjelighed til at vende i den samme retning. De skaber derved en spontan magnetisering af stoffet.

Denne magnetisering kan kun forekomme ved temperaturer under den såkaldte Curie-temperatur, T_c . For temperaturer over denne kritiske temperatur vil magnetiseringen forsvinde og atomernes magnetiske dipoler vil være uordnede. Det er undersøgelsen af denne faseovergang mellem den ordnede og den uordnede tilstand, der er hovedopgaven med Ising-modellen.

Laves Ising-modellen i 1 dimension er der ingen faseovergang, hvorimod der i 2 og 3 dimensioner meget gerne skulle være en. Vi har valgt at opstille modellen i 2 dimensioner, da der ses de samme kvalitative resultater som i 3, blot er der ikke så mange udregninger.

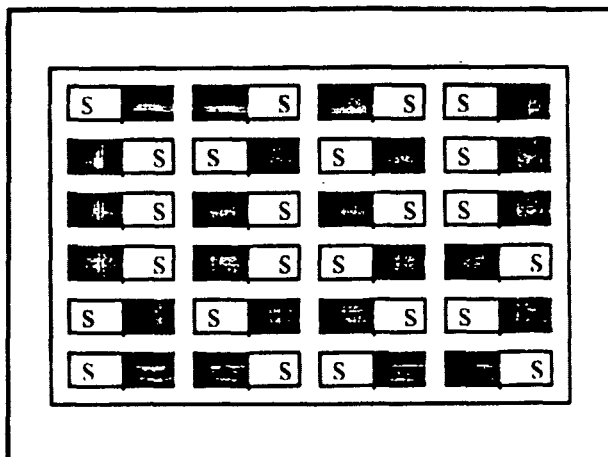
Ising-modellen i 2 dimensioner blev løst analytisk af den norske fysiker Lars Onsager, for hvilket han modtog en nobelpris.

Opstilling af Ising-modellen.

Vi opretter et gitter med X gitterpladser på den ene led og Y på den anden, dvs. med ialt $X \cdot Y$ felter. Hver plads symboliserer et atom, hvis magnetiske dipolmoment er enten "op" eller "ned". En plads, s , navngives efter søjle-nummer, i , og række-nummer, j , således at den kaldes s_{ij} . Hvis spinnets på en plads er "op", tildeles det tilhørende s_{ij} værdien $+1$ og omvendt, hvis spinnets er "ned" får det tilhørende s_{ij} værdien -1 .

Systemets samlede magnetiske moment M , er summen af alle s_{ij} -værdier:

$$M = \sum_{ij} s_{ij}$$

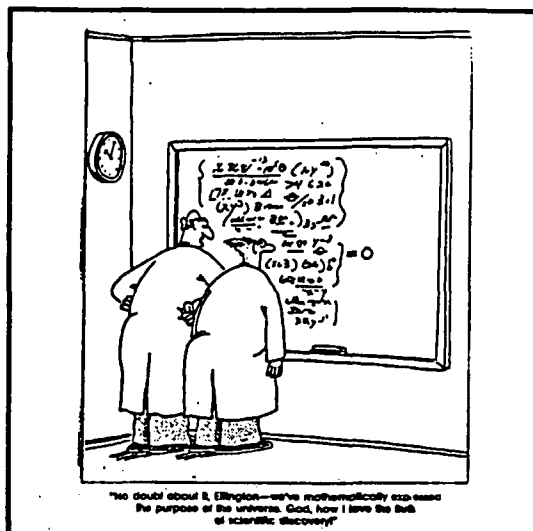


Figur C.1. Et stykke metal kan opfattes som en mængde små magneter.

Energien på en gitterplads defineres på følgende måde.

$$e = -J * s_{ij} (s_{i-1,j} + s_{i,j-1} + s_{i+1,j} + s_{i,j+1})$$

Vi har at gøre med en ferromagnet, hvorfor det skal favoriseres at to nabospin vender i samme retning, fremfor at de vender modsat hinanden. Dette sker når J er positiv, da to ensrettede nabospin således vil have en mindre indbyrdes energi end to modsat rettede. At to spin vender hver sin vej, favoriseres når J er negativ (anti-ferromagnetisme).



Systemets samlede energi, E , er summen af energiværdierne på alle pladser. Problemet med at bestemme naboplads til de yderst beliggende pladser i gitteret, tackles ved at vi bruger periodiske randbetingelser. Dvs. man forestiller sig at gitteret "bider sig selv i halen".

Nu er modellen stillet op. I selve simuleringen benytter vi os af den såkaldte Monte Carlo-simuleringsmetode.

Hvad er Monte Carlo-metoden ?

Monte Carlo-metoden er kendetegnet ved brugen af input fra en tilfældighedsgenerator til numerisk løsning af integraler, samt udnyttelsen af såkaldte ensembler til beregning af makroskopiske værdier for systemet.

Hvad er et ensemble ?

De tidligere nævnte værdier, M og E , er makroskopiske størrelser, som normalt bestemmes som et tidsgennemsnit – dvs. gennem tidsmidling, når de måles i laboratoriet. Efter at have målt i et vist stykke tid (der typisk er meget kort i laboratoriet), regner man med at systemet (der er i ligevægt) har gennemgået alle de forskellige konfigurationer af mikrotilstande, der karakteriserer den gældende makrotilstand.

En anden metode til midling af makroskopiske værdier er ensemblemidling.

Man midler istedet over et stort antal makroskopisk identiske systemer, der hver især har forskellige mikrotilstande. Princippet svarer til at man istedet for at tage 1 terning og slå 100 gange med den, forså at finde gennemsnittet, tager 100 terninger og slår 1 gang. Alle disse overordnet identiske systemer kaldes et ensemble.

Mikrotilstandene er fordelt efter en hvis sandsynlighed. Et ensemble, der, som i tilfældet med terningen, hvor sandsynligheden for hver mikrotilstand (1,2,...,6) er ligeligt fordelt, kaldes et mikrokanonisk ensemble.

I vores Ising-model er systemet omgivet af et varmebad, der sørger for at holde temperaturen

konstant. Derimod kan energien ændres, da der kan udveksles energi mellem systemet og varmebadet. Idet varmebadet er meget større end systemet, ændres temperaturen ikke af energiudvekslingerne.

Ensemblet for et sådant system kaldes det kanoniske ensemble og teorien siger at de forskellige mikrotilstande, der udgør ensemblet, fordeles sig med den såkaldte Boltzmann fordeling:

$$p(s_n) = p_0 * e^{-E_n/k_B T}$$

Sandsynligheden for at finde systemet i mikrotilstanden s_n , bestemmes af systemets energi i den pågældende mikrotilstand (E_n) og systemets temperatur (T).

Monte Carlo simulering af Ising-modellen.

Metropolis-algoritmen.

Det vi ønsker, at finde ved vores simuleringer er, en (eller flere) fysiske størrelser, f , som vi kan måle i laboratoriet. En sådan makroskopisk størrelse er givet ved en vægtet sum af f 's værdi for samtlige mikroskopiske tilstande:

$$f_{MAKRO} = \langle f \rangle = \sum_{i=1}^N f(S_i) p(S_i)$$

Dette er en ensemble-midling, hvor vi midler over samtlige mulige mikrotilstande i systemet ($S_1 \dots S_N$).

Problemet ved at udregne $\langle f \rangle$ på denne måde er størrelsen af N . For et 16x16 gitter, som er det mindste af de systemer vi simulerer, er $N = 2^{16 \cdot 16} = 1.16 \cdot 10^{77}$. Hvis vi forestiller os, at vi havde en computer, der kunne gennemgå 10^9 mikrotilstande pr. sekund (en sådan eksisterer ikke), ville opgaven tage $3.69 \cdot 10^{60}$ år ($= 8.03 \cdot 10^{50}$ gange solens alder)!

I mellemtiden kunne man måske tænke lidt nærmere over hvad det er man har sat computeren til at regne ud: En sum, hvor langt de fleste led er helt uden betydning, fordi $p(S_i)$ er meget lille. Dette kan vi undgå, ved at udtrykke $\langle f \rangle$ på følgende måde:

$$\langle f \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(S_k)$$

...hvor S_k vælges med sandsynligheden $P(S_i)$ hver af de n gange. Dette nye udtryk for $\langle f \rangle$ kan vi approksimere til:

$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(S_k)$$

... for "tilstrækkeligt" store n .

Problemet består nu i at vælge S_i med sandsynligheden $P(S_i)$. Her er det, at Metropolis-algoritmen kommer med en løsning: Man lader S_i udføre en Random-Walk (systemet springer fra S_i til s_j med sandsynligheden $W(S_i, S_j)$, for hvilket det gælder, at fordelingen af S_i konvergerer mod $P(S_i)$, for k gående mod uendelig.

Der skal altså gælde, at:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} q(S_i, k) = P(S_i)$$

...hvor $q(S_i, k)$ er brøkdelen af gange systemet har været i S_i , efter k skridt. For k gående mod uendeligt skal der altså gælde:

$$\begin{aligned} q(S_i, k+1) - q(S_i, k) &= 0 \\ \updownarrow \\ \sum_{j < i} q(S_j, k) W(S_j, S_i) - \sum_{j > i} q(S_j, k) W(S_j, S_i) &= 0 \\ \updownarrow \\ \sum_{j < i} [P(S_j) W(S_j, S_i) - P(S_i) W(S_i, S_j)] &= 0 \end{aligned}$$

Det ses umiddelbart, at dette er opfyldt ved:

$$P(S_i) W(S_i, S_j) = P(S_j) W(S_j, S_i)$$

... hvilket også kaldes "detailed balance".

"Detailed balance" er opfyldt, hvis vi vælger overgangssandsynlighederne på følgende måde:

$$W(S_i, S_j) = \min\left[1, \frac{P(S_j)}{P(S_i)}\right]$$

...hvilket ses ved indsættelse:

$$\begin{aligned} P(S_j) * \min\left[1, \frac{P(S_j)}{P(S_i)}\right] &= P(S_i) * \min\left[1, \frac{P(S_i)}{P(S_j)}\right] \\ \updownarrow \\ \min[P(S_j), P(S_i)] &= \min[P(S_i), P(S_j)] \end{aligned}$$

Hvis vi vil have Metropolis-algoritmen til at give Boltzmann-fordelingen skal vi altså anvende følgende overgangssandsynlighed:

$$W(S_i, S_j) = \min\left[1, \frac{P(S_j)}{P(S_i)}\right] = \min\left[1, \frac{e^{-E_j/k_B T} / Z}{e^{-E_i/k_B T} / Z}\right] = \min\left[1, e^{-\Delta E/k_B T}\right]$$

Vi vil nu opskrive Metropolis-algoritmen punktvis, som vi har anvendt den til simulering af ising-modellen (i 2 dimensioner):

- 1). Vælg start-konfiguration: Hvert spin sættes til "op" (sandsynlighed = p) eller "ned"

(sandsynlighed = $1 - p$). Normalt anvendes $p=0.5$, se dog senere.

- 2) Udvalg i tilfældigt et spin.
- 3) Udregn den tilvækst i systemets energi ΔE , som vil være et resultat af et flip af det udvalgte spin ("op" ændres til "ned", eller omvendt).
- 4) Hvis $\Delta E < 0$, dvs. hvis systemets energi falder, accepteres spin-flippet.
- 5) Hvis $\Delta E > 0$ accepteres spin-flippet med følgende sandsynlighed:

$$p(\Delta E) = e^{-\Delta E/k_B T}$$

- 6) Opdater værdierne af de ønskede fysiske størrelser.
- 7) Gentag 2) til 6) "tilstrækkeligt" antal gange.

Kommentarer til programmet.

Ved anvendelse af programmet skal brugeren indtaste følgende:

- 1) X og Y, størrelsen på gitteret.
- 2) T_START og T_SLUT, temperatur-intervallet simuleringen skal køres over.
- 3) TEMPERATURER, antal temperaturer der skal anvendes, temperatur-intervallet.
- 4) KØRSLER, antal kørsler der skal midles over, når de fysiske størrelser skal udregnes. Bør (ideelt) vælges så, middelværdien af de fysiske størrelser har samme størrelse, som deres respektive grænseværdier for KØRSLER gående mod uendelig. 1 "kørsel" er $X \cdot Y$ flip-forsøg.
- 5) INDKØRSLER, antal kørsler der skal gennemføres inden midlingen begynder. Bør vælges så systemet, for en givet temperatur, når at indfinde sig i ligevægt (dvs. en konfiguration som har stor sandsynlighed ifølge Boltzmann-fordelingen).
- 6) P_{op} , se ovenstående. Fordelen ved at kunne anvende $P_{op} < 0.5$ fremgår af følgende: I simuleringen anvendes oftest et temperatur-interval som går et stykke på begge sider af det kritiske punkt, hvor faseovergangen sker. Dette betyder, at systemet startes i en lav temperatur, hvor stoffet er stærkt ferromagnetisk. I denne situation bør $|M|$ være næsten maksimal (cirka 1), hvilket vil sige at næsten alle spin er ens. Hvis vi nu vælger $P_{op}=0.5$, så starter vi systemet meget langt fra ligevægt idet $|M|$ er meget tæt på nul, hvilket betyder at INDKØRSLER skal være meget stor for at vi får fornuftige resultater. Dette undgås ganske simpelt ved, at vælge $P_{op}=1$ (eller 0).

I programmet angives T i enheder af k_B og der anvendes $J=1$, da det er det nemmeste, når vi ikke forsøger at simulere magnetiseringen af et bestemt stof.

Når simuleringen for én temperatur er færdig bliver slut-konfigurationen anvendt som start-konfiguration for den næste tur. Dette betyder, at systemet altid startes tæt ved ligevægt, hvilket vil sige, at INDKØRSLER ikke behøver være så stor.

Programmet findes desuden i en version der kun laver simuleringen ved én temperatur, men som til gengæld udskriver middel værdien af de fysiske størrelser løbende (altså KØRSLER gange). Denne version anvendes til at bestemme fornuftige værdier af KØRSLER og INDKØRSLER (se omtale af resultater).

I programmet beregner og udskrives følgende størrelser:

- 1) E, den samlede energi i systemet pr. spin, midlet over KØRSLER ($-2 \leq E \leq 2$). E er fundet ved, at summere systemets energi efter hver kørsel, for til sidst at dividere med KØRSLER og med antal spin ($X \cdot Y$). Ved at dividere systemets samlede energi med antal spin får vi en energi-densitet, som er uafhængig af gitterstørrelsen.
- 2) $\langle |M| \rangle$, det samlede magnetiske moment pr. spin, midlet over KØRSLER ($0 \leq |M| \leq 1$). Det er den numeriske værdi der er interessant, da den teoretiske værdi for M er nul!: For en givet temperatur (og ved fravær af eksternt magnetisk felt) gælder følgende: Sandsynligheden for en given konfiguration er den samme som for den modsatte konfiguration (alle spin i modsat position). Dette betyder, at en "perfekt" ensemblemidling giver $M=0$.
- 3) C, den specifikke varmekapacitet, givet ved:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

- 4) M_{SUS} , den magnetiske susceptibilitet, givet ved:

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial \langle |M| \rangle}{\partial H} = \frac{\langle |M|^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{k_B T}$$

...hvor H er et eksternt magnetisk felt.

- 5) Ratio, den brøkdelt af flip-forsøgene der er blevet accepteret.

Resultater.

Som mål for vores simuleringer satte vi os det mål, at vi for et 16x16 og 32x32 gitter ville opnå følgende:

- 1) At se faseovergangen! Dvs. en kvalitativ vurdering af vores resultater.
- 2) Bestemme eksponenten β der indgår i følgende "power-law":

$$|M(T) = k(T_c - T)^p$$

...hvor T_c er den kritiske temperatur. Dette vil vi gøre for, at få en kvantitativ vurdering af vores resultater (eller i hvert fald for en af dem).

Vi forventede fra starten, at større gitterstørrelse ville give bedre resultater, hvilket vi ville efterprøve ved at anvende to forskellige størrelser.

Vi vil nu gennemgå resultaterne for 16x16 ising-modellen:

Første skridt var at finde frem til en værdi INDKØRSLER. Dette gjorde vi ved at anvende versionen af programmet med løbende udskrift af værdierne. Temperaturen satte vi til 2.28, da dette er i nærheden af T_c (=2.269), hvor de største værdier af KØRSLER og INDKØRSLER er påkrævet for at få "pæne" resultater (se def. af c). Vi valgte INDKØRSLER=0 og $p=0.5$, og så nu nærmere på de fremkomne kurver for middelværdierne af de forskellige størrelser (se graf 1). Problemet var nu at afgøre hvornår systemet var nået til en ligevægt. Dette valgte vi at definere, som det sted hvor kurven for ratio "flader ud", da det her lod til at effekterne fra den tilfældige start-konfiguration var forsvundet (hvilket er ret svært at se på de andre kurver). På grundlag af disse overvejelser valgte vi at anvende INDKØRSLER = 500.

Vi har i ovenstående overvejelser set bort fra effekten af, at systemet for hver temperatur startes tæt på ligevægten. Vi har ikke fundet det formålstjenligt, at "spare" på INDKØRSLER da den typisk er ret lille i forhold til KØRSLER.

Andet skridt var at bestemme en værdi for KØRSLER. Til dette formål lavede vi en simulering med $T=2.28$, INDKØRSLER=500 og $p=0.5$ (se graf 2+3). Ud fra denne simulering bestemte vi så vor mange kørsler der skulle til for at middelværdierne var (næsten) konstante, dvs. hvornår det ikke kunne betale sig at lave flere kørsler. På denne måde blev KØRSLER valgt til 10000.

Ved nærmere studie af graf 3 kan det ses, at vi har opgivet at få en pæn kurve for M_{SUS} , hvilket selvfølgelig vil give effekter senere hen.

Vi lavede nu en simulering i temperatur-intervallet 1.9 til 2.5, med KØRSLER=10000, INDKØRSLER=500 og $p=1.0$. Desuden lavede vi en simulering i et større interval, fra 1 til 4, med KØRSLER = 4000, INDKØRSLER=400 og $p=1.0$. På graferne 4-6 ses resultatet af den sidste af de to simuleringer, med resultatet fra den første simulering "kopieret" ind for det interessante/besværlige interval 1.9-2.5. For begge simuleringer blev der anvendt TEMPERATURER=31.

Det ses tydeligt på graferne, at der er en faseovergang omkring den teoretiske værdi T_c . Faseovergangen er dog ikke så skarp, at vi umiddelbart kan bestemme en "målt" værdi for T_c . Det nærmeste vi kommer er maksimum af kurven for C, som ligger ved $T=2.30$.

B bestemmes ved at indtegne $|m|$ som funktion af T_c-T på et dobbelt-logaritmisk papir, og måle hældningen af den fittede rette linje (se graf 6). På denne måde findes (med en vis

usikkerhed) $\beta = 0.85/8$

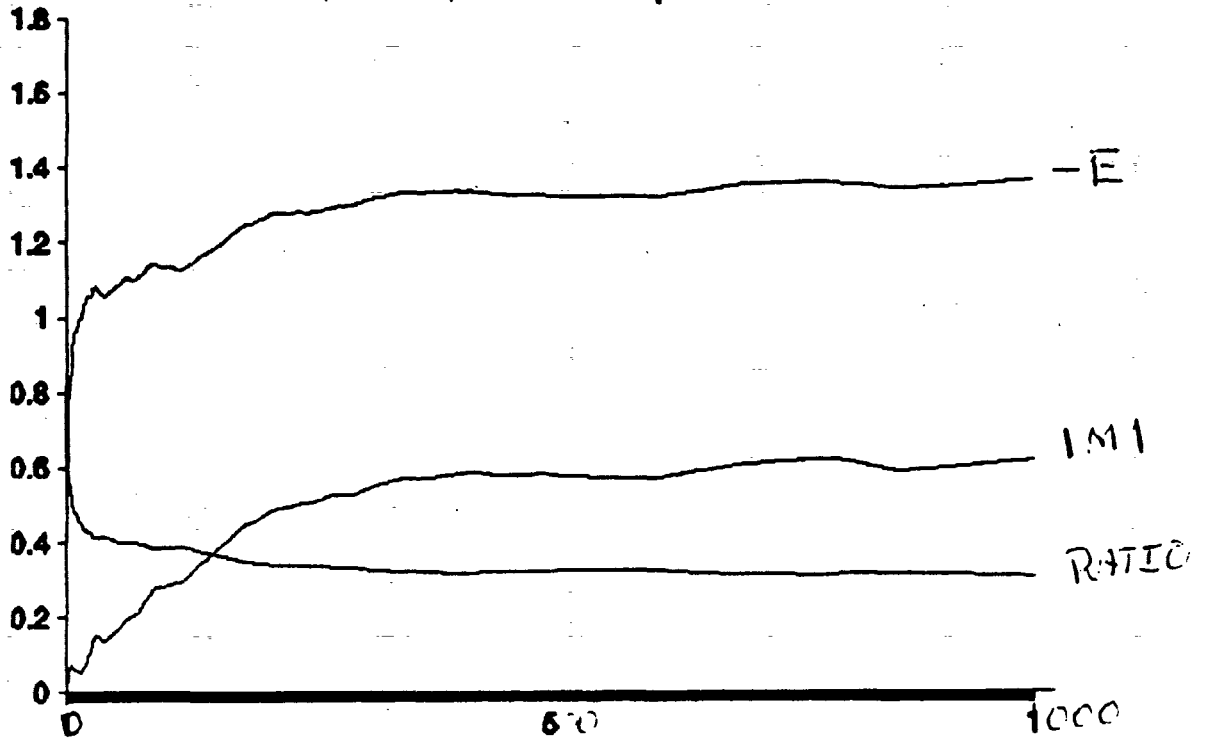
Teoretiske værdi (for uendeligt stort gitter): $1/8$

INDKØRSLER og KØRSLER for simuleringen af 32×32 Ising-modellen er fundet på samme måde som ovenfor. Resultatet af denne simulering ses på graferne 8-10. Det ses med "det blotte øje", at faseovergangen er mere skarp, som vi forventede. Dette viser sig også ved, at den fundne værdi for β er større, nærmere betegnet: $\beta=1.30/8$ (se graf 11).

ISING 16x16 T=2.28

GRAF 1

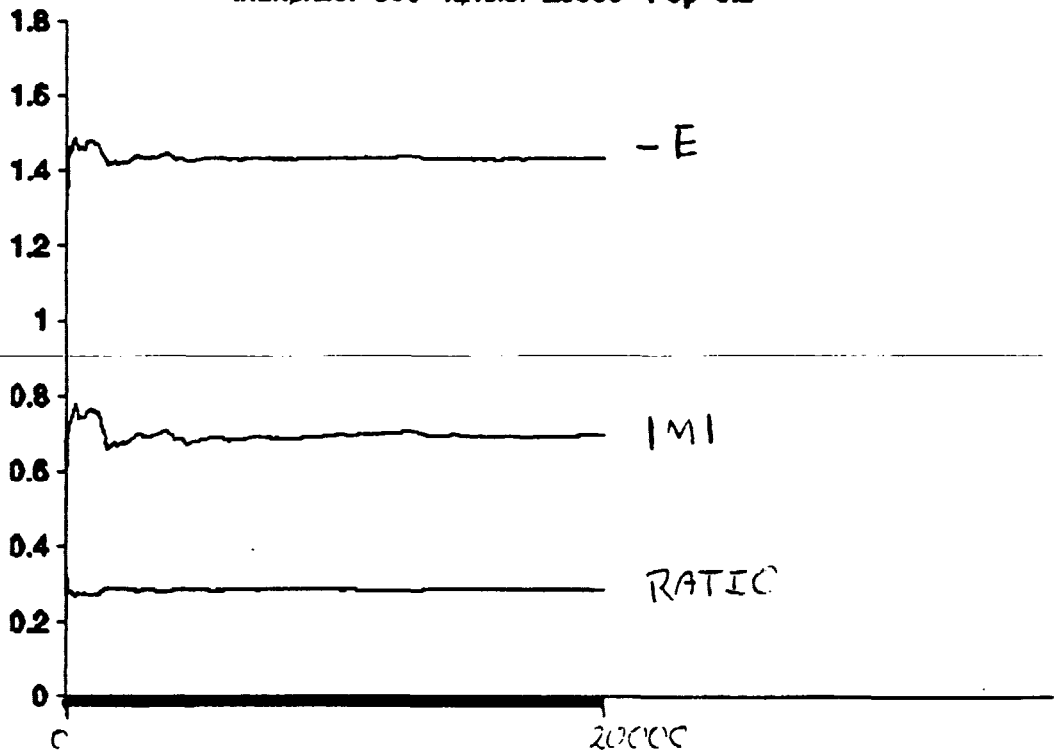
Indkørster=0 kørster=1000 Pop=0.5



ISING 16x16 T=2.28

GRAF 2

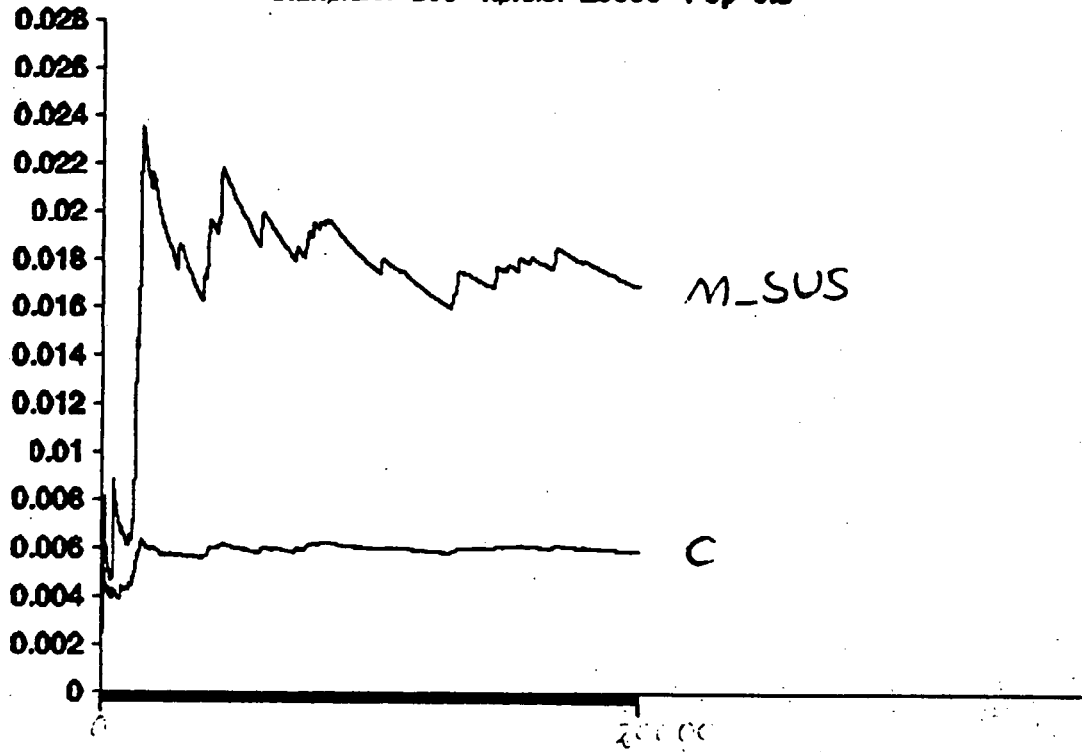
Indkørster=500 kørster=20000 Pop=0.5



ISING 16x16 T=2.28

GRAF 3

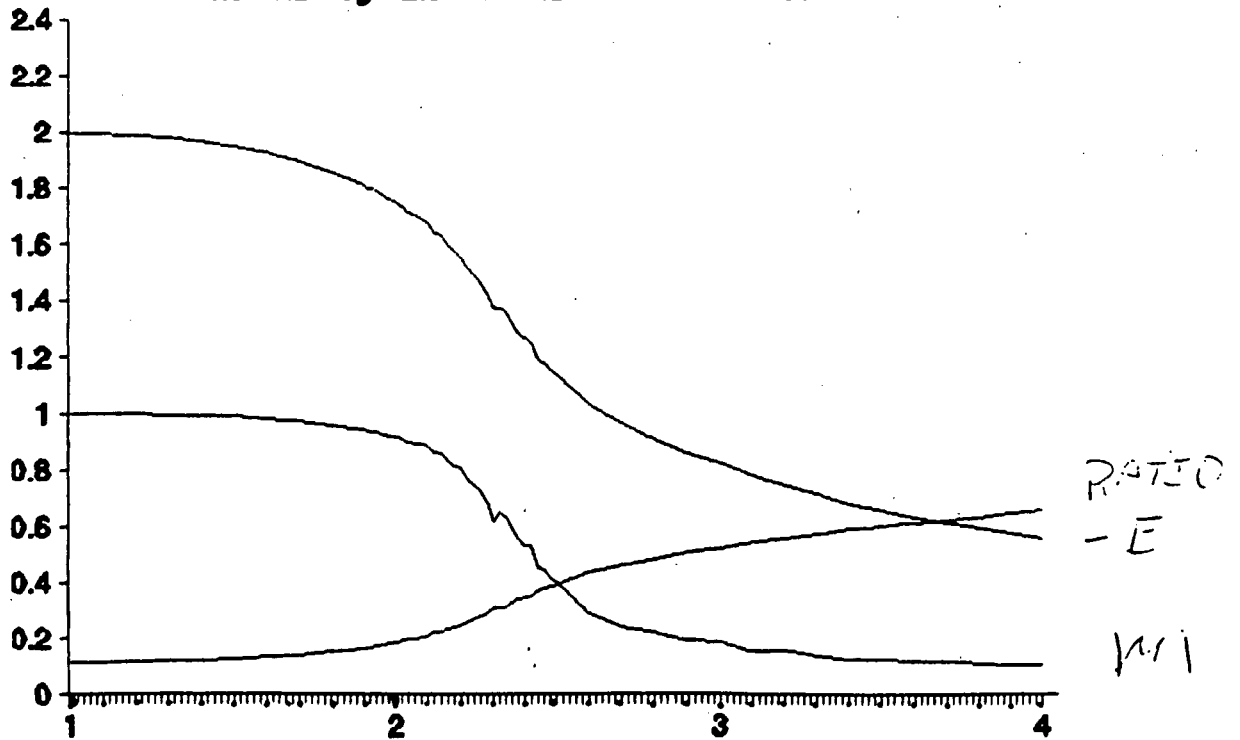
Indkørslør=500 kørslør=20000 Pop=0.5



ISING 16x16. 1.9-2.5: IND=500 MIDL=10000

GRAF 4

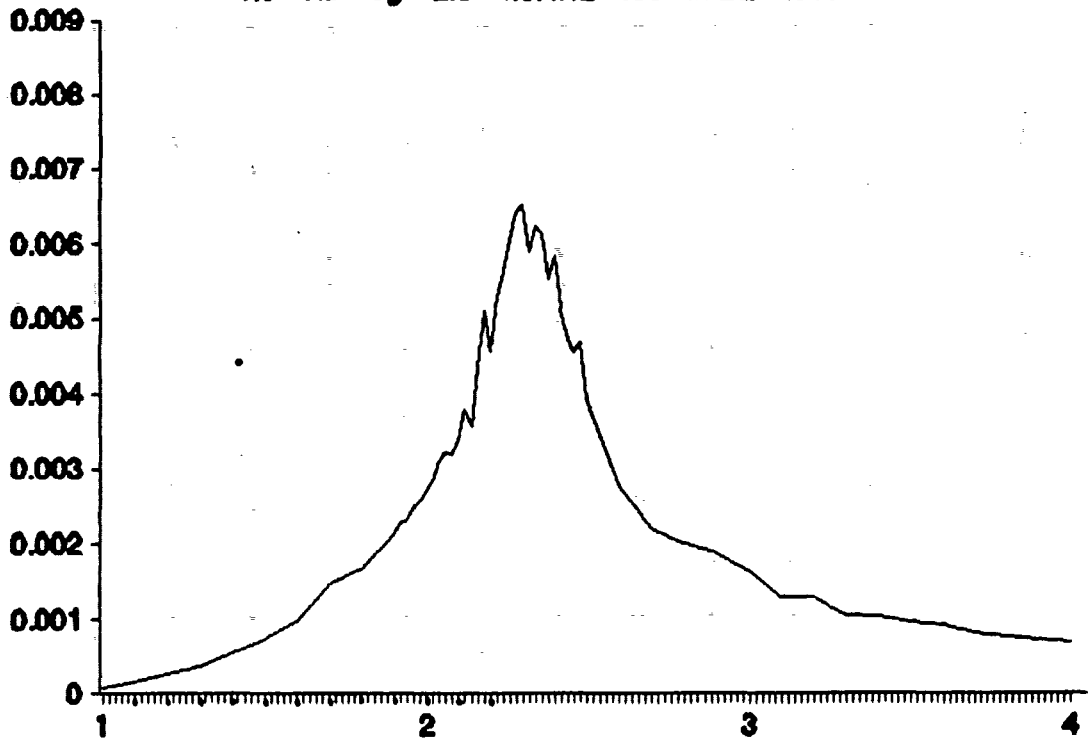
1.0-1.8 og 2.6-4.0: IND=400 MIDL=4000



ISING 16x16. 1.9-2.5: IND=500 MIDL=10000

GRAF 5

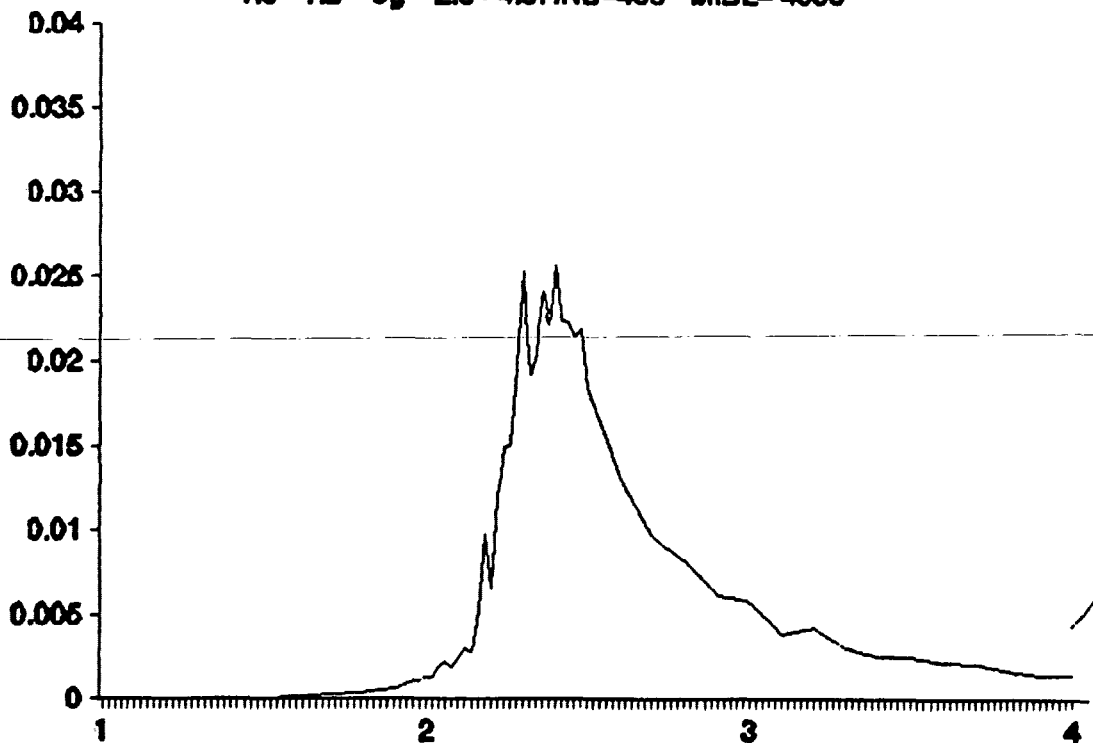
1.0-1.8 og 2.6-4.0: IND=400 MIDL=4000



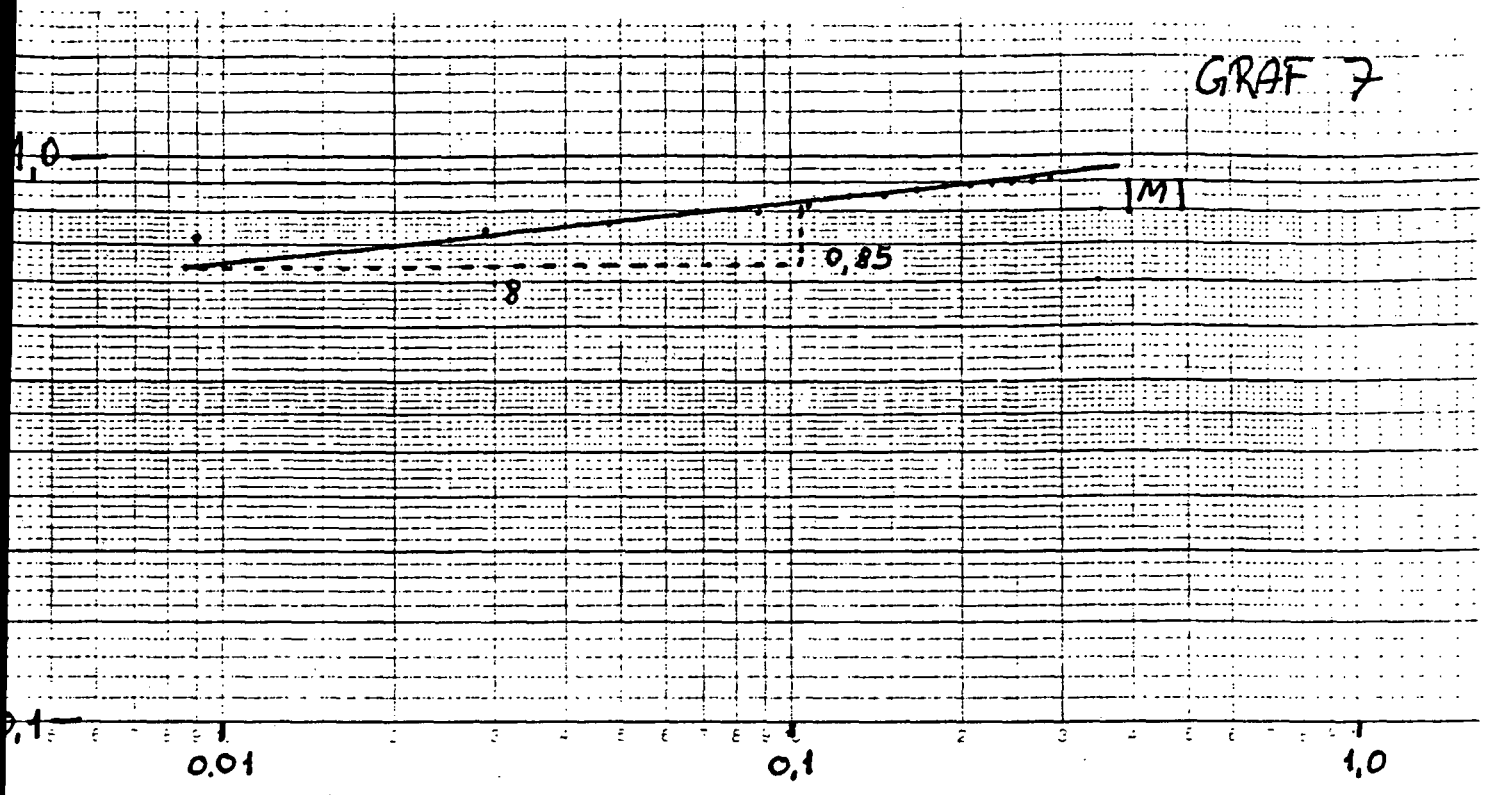
ISING 16x16. 1.9-2.5: IND=500 MIDL=10000

GRAF 6

1.0-1.8 og 2.6-4.0: IND=400 MIDL=4000

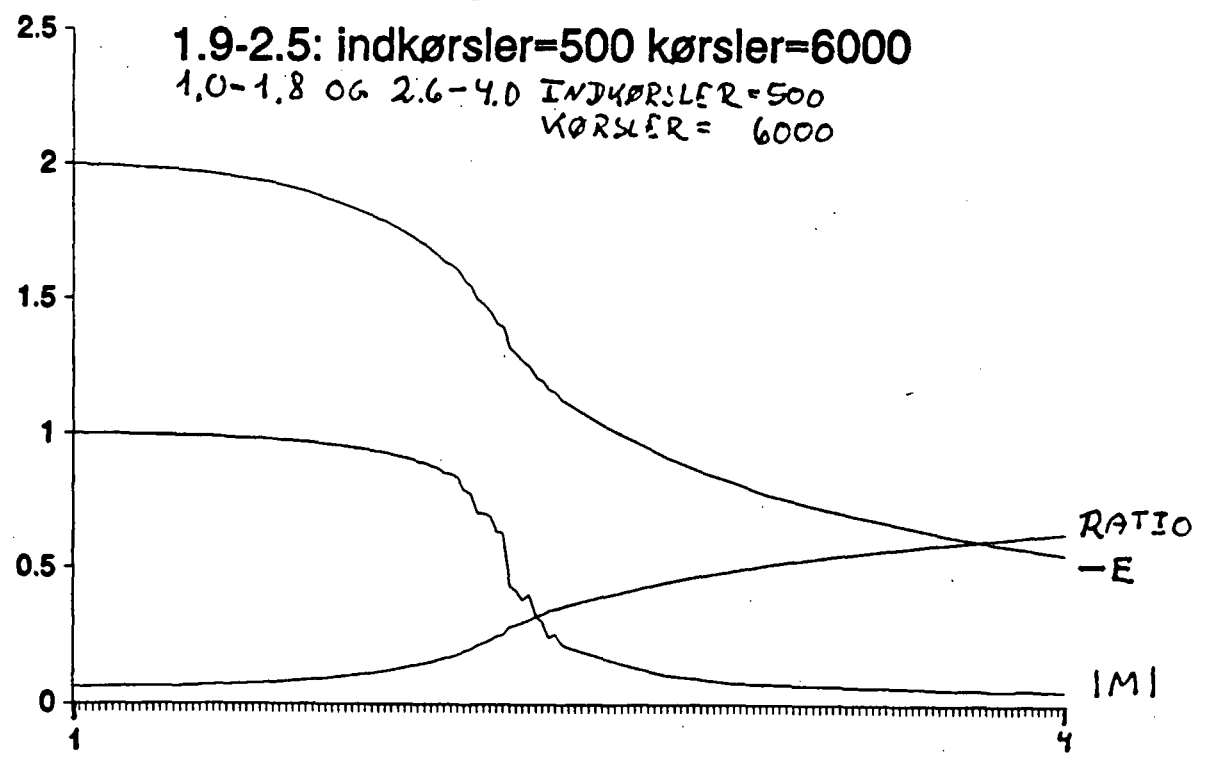


GRAF 7



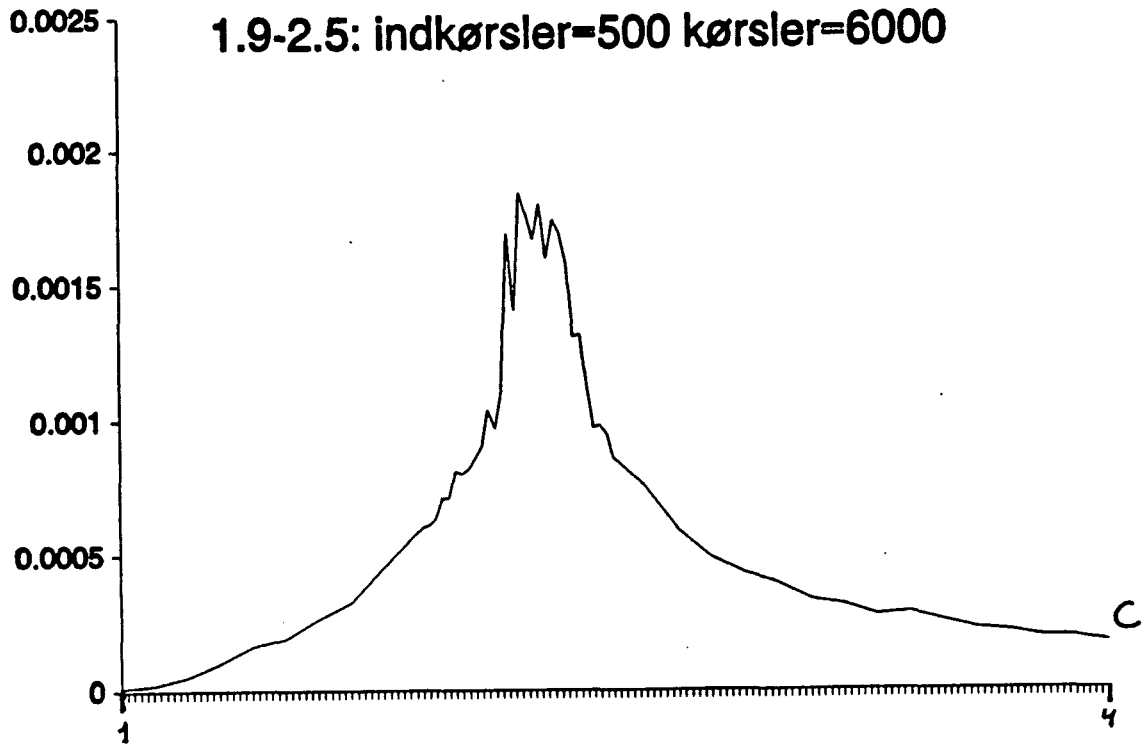
ising 32x32

GRAF 8



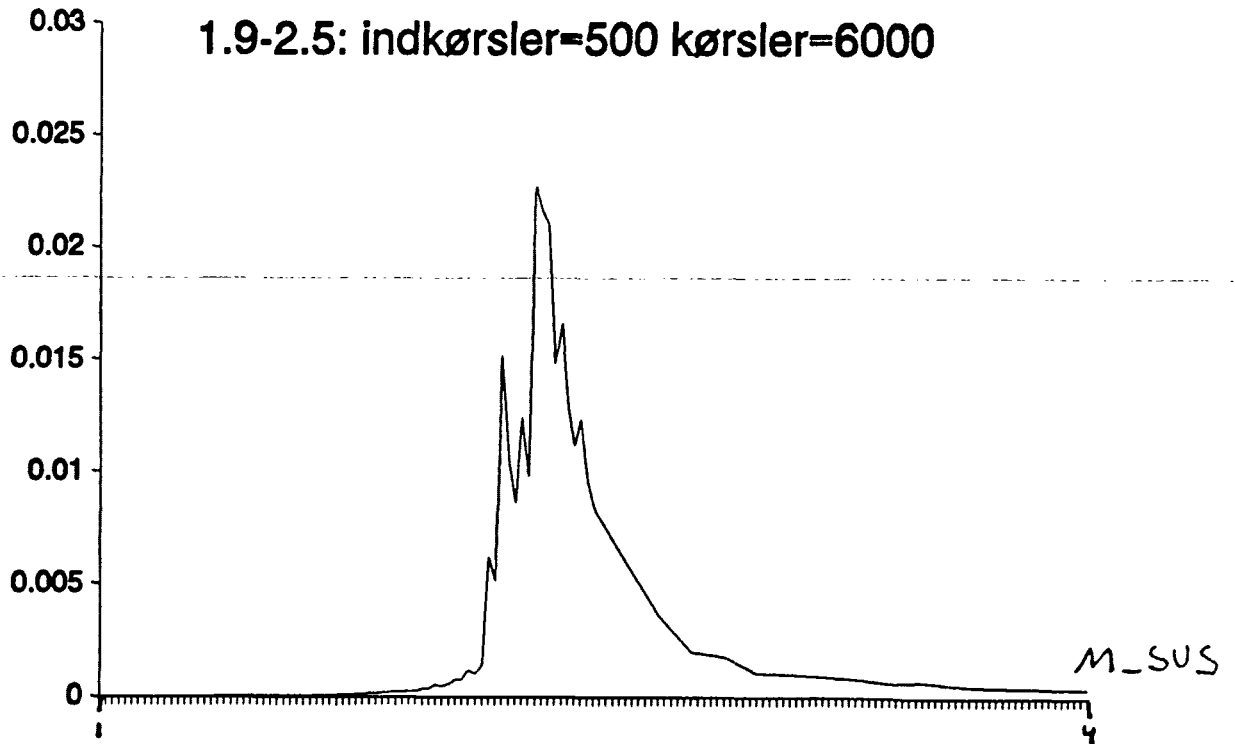
ising 32x32

GRAF 9

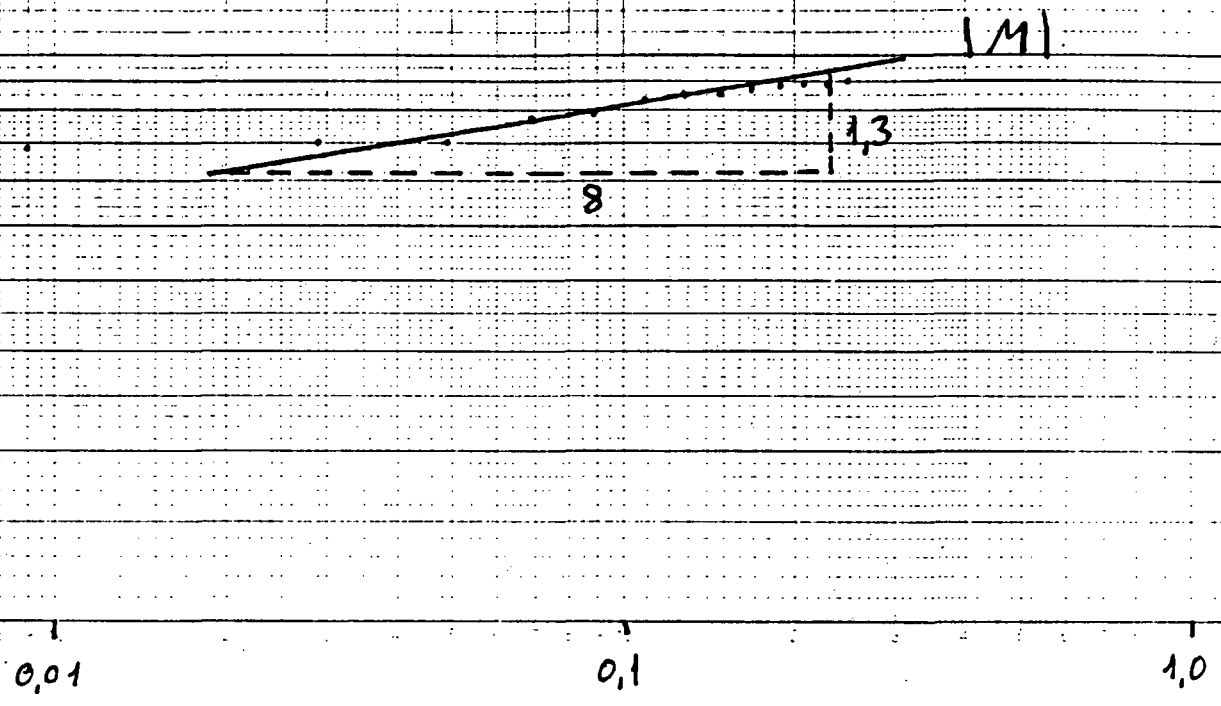


ising 32x32

GRAF 10.



GRAF 11



Appendix D.

Teorien bag hopmodellen.

FD-teoremet.

Hvis man påvirker et system i ligevægt med et ydre tidsafhængigt felt (magnetisk felt, elektrisk felt osv.), vil feltet forstyrre systemet og ændre gennemsnitsværdierne af de fysiske størrelser, fra de værdier de havde, inden feltet blev tilføjet. Hvis feltet er svagt er sammenhængen mellem ændringen af den fysiske størrelse, A , og feltet, h , givet ved:

$$\langle A(t) \rangle_h - \langle A \rangle_0 = \int_{-\infty}^t \mu(t-t') * h(t') dt' \quad (1)$$

hvor $\langle A(t) \rangle_h$ er værdien af A til tiden t , hvor feltet er tilføjet, og $\langle A \rangle_0$ er ligevægtsværdien af A , når der ikke er noget ydre felt.

Funktionen $\mu(t)$ kaldes en responsfunktion.

I mange tilfælde kan der findes en størrelse $B(x)$, således at den potentielle energi som systemet tilføres, som følge af det påtrykte felt, er givet ved:

$$U(x,t) = -h(t) * B(x) \quad (2)$$

x angiver her en bestemt mikrotilstand af systemet.

I disse tilfælde kan responsfunktionen udtrykkes som:

$$\mu(t) = -\frac{1}{k_B T} \frac{d}{dt} C_{AB}(t) \quad (3)$$

Dette er FD-teoremet!

C_{AB} er tidskorrelationsfunktionen for A og B . Det er en ensemblemidling af størrelsen $A(t) * B(0)$ for en bestemt værdi af t for et system i ligevægt, der ikke er påvirket af et ydre felt:

$$C_{AB} = \langle A(t) * B(0) \rangle \quad (4)$$

FD-teoremet etablerer altså en sammenhæng mellem hvordan systemet reagerer på en ydre påvirkning (givet ved responsfunktionen) og dets fluktuationer i ligevægt (udtrykt ved

korrelationsfunktionen).

Udledning af FD-teoremet.

Vi vil her beskrive en udledning af FD-teoremet taget fra Doi & Edwards [1].

For at bevise ligning 3 forestiller vi os den situation, at et konstant felt h påvirker et system i så lang tid, at systemet kommer i ligevægt. Feltet bliver derefter afbrudt til tiden $t=0$ (se figur 1).

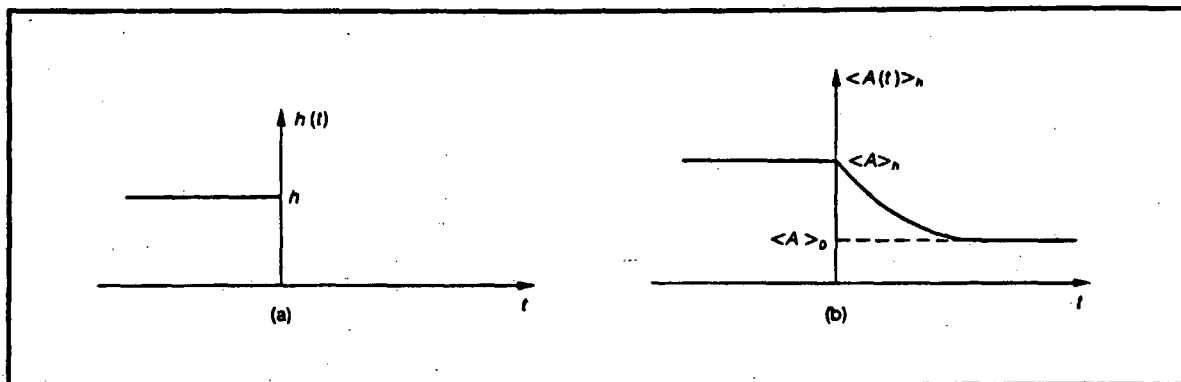


Fig. D.1. Når feltet afbrydes til $t=0$, falder værdien af A fra ligevægtsværdien, når det ydre felt er på, $\langle A \rangle_h$, til ligevægtsværdien når det ikke er, $\langle A \rangle_0$.

Gennemsnitsværdien af A vil ændres som vist på figur D.1,b:

$$\langle A(t) \rangle_h = \alpha(t) * h + \langle A \rangle_0 \quad (5)$$

Funktionen $\alpha(t)$ kaldes relaxationsfunktionen og det ses ud fra ligning 1, at den er lig:

$$\alpha(t) = \int_{-\infty}^0 \mu(t-t') dt' = \int_t^{\infty} \mu(t') dt' \quad (6)$$

hvor $t=0$ i den øvre grænse i integralet, fordi feltet er 0 for $t > 0$.

$\langle A(t) \rangle_h$ kan beregnes, hvis fordelingsfunktionen $P(x,t)$ er kendt. $P(x,t)$ angiver sandsynligheden for, at systemet befinder sig i mikrotilstanden x til tiden t . $\langle A(t) \rangle_h$ er dermed givet ved:

$$\langle A(t) \rangle_h = \int A(x) * P(x,t) dx \quad (7)$$

hvor $A(x)$ er værdien af A , når systemet er i tilstanden x , og der integreres over alle mikrotilstande.

$P(x,t>0)$ er relateret til $P(x,t=0)$ via overførselsfunktionen $G(x,x';t)$. Denne angiver sandsynligheden for at systemet uden ydre felt, som er i tilstanden x' til tiden $t=0$, vil være i tilstanden x til tiden t . Altså beskriver $G(x,x';t)$ systemets dynamik, når det ikke er påvirket af et ydre felt:

$$P(x,t) = \int G(x,x';t) * P(x',0) dx' \quad (8)$$

Systemet er i ligevægt med feltet tilsluttet til tiden $t=0$, altså er $P(x,0)$ givet ved Boltzmann fordelingen, hvor energien i tilstanden x består af to dele. Den indre energi $U(x)$ systemet har, når feltet er fraværende, og den energi systemet tilføjes af feltet, der ifølge ligning 2 er givet ved $-h * B(x)$:

$$P(x,0) = \frac{e^{-\frac{U(x)+h * B(x)}{k_B T}}}{\int e^{-\frac{U(x)+h * B(x)}{k_B T}} dx} \quad (9)$$

Dette rækkeudvikles med h som den variable til:

$$P(x,0) = \frac{e^{-\frac{U(x)}{k_B T}} * (1 + h * B(x)/k_B T)}{[\int e^{-\frac{U(x)}{k_B T}} dx] * (1 + h * \langle B \rangle_0 / k_B T)} \quad (10)$$

↓

$$P(x,0) = P_{eq}(x) * (1 + \frac{h * [B(x) - \langle B \rangle_0]}{k_B T})$$

hvor $P_{eq}(x)$ er fordelingsfunktionen for systemet i ligevægt uden noget ydre felt tilsluttet:

$$P_{eq}(x) = \frac{e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}{\int e^{-\frac{U(x)}{k_B T}} dx} \quad (11)$$

og $\langle B \rangle_0$ er lig:

$$\langle B \rangle_0 = \int B(x) P_{eq}(x) dx \quad (12)$$

Ved at indsætte ligning 8 og 10 i ligning 7 ses det at:

$$\langle A(t) \rangle_h = \int [\int A(x) G(x,x';t) P_{eq}(x') * (1 + \frac{h[B(x') - \langle B \rangle_0]}{k_B T}) dx'] dx \quad (13)$$

Ud fra definitionen af overførselsfunktionen ses det, at der må gælde:

$$\int G(x,x';t) P_{eq}(x') dx' = P_{eq}(x) \quad (14)$$

...uanset hvilket t der vælges, da systemet netop er i ligevægt.

Tidskorrelationsfunktionen er defineret som (se omtale ved ligning 4) :

$$\langle A(t) * B(0) \rangle = \int [\int A(x) B(x') G(x, x'; t) P_{eq}(x') dx'] dx \quad (15)$$

Ligningen udtrykker, at hvis systemet er i tilstanden x til tiden t og tilstanden x' til tiden 0 er de målte værdier af A og B henholdsvis $A(x)$ og $B(x')$. Sandsynligheden for at dette hænder i ligevægt er $G(x, x'; t) * P_{eq}(x')$. Ved at midle over alle tilstande x og x' fremkommer ligning 15.

Ved at benytte ligning 14 og 15 kan ligning 13 skrives som:

$$\langle A(t) \rangle_h = \langle A \rangle_0 + \frac{\hbar}{k_B T} \int [\int A(x) G(x, x'; t) (B(x') - \langle B \rangle_0) P_{eq}(x') dx'] dx$$

↓

$$\langle A(t) \rangle_h = \langle A \rangle_0 + \frac{\hbar}{k_B T} [\langle A(t) B(0) \rangle - \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0]$$

Ud fra ligning 5 følger det så at:

$$\alpha(t) = \frac{1}{k_B T} (C_{AB}(t) - \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0) \quad (17)$$

⇓

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = \frac{1}{k_B T} \frac{d}{dt} C_{AB}(t)$$

Endvidere er $\alpha(t)$ ifølge ligning 6 lig:

$$\alpha(t) = - \int_0^t \mu(t') dt' \quad (18)$$

⇓

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = -\mu(t)$$

Ved at sammenholde ligning 17 og 18 fås FD-teoremet.

Sammenhængen mellem den makroskopiske og den mikroskopiske beskrivelse af vores system.

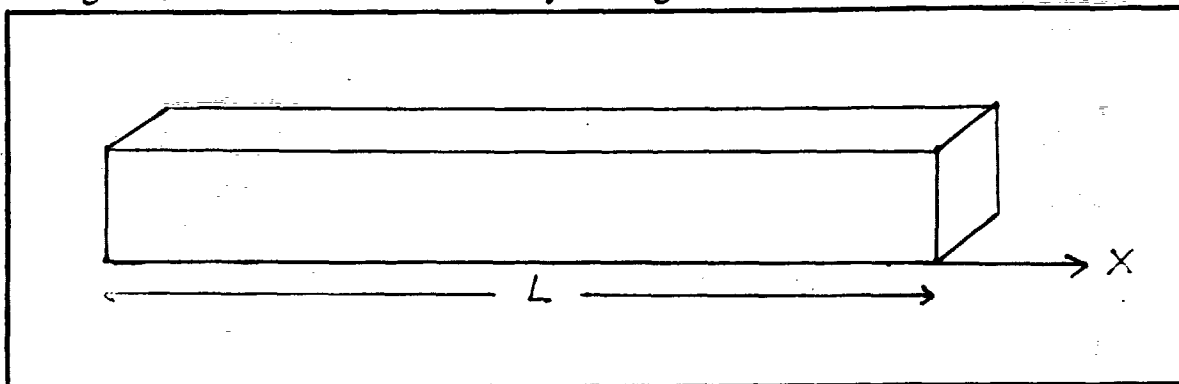
Til udledningen af Kubo-formlen (se senere) bruger vi ligningerne fra den lineære responsteori.

I responsteorien betragter man sit system som en black box, der undersøges ved at tilføre det et bestemt input og iagttage outputtet. Alt efter hvilken input/output der anvendes, defineres en række responsfunktioner, som beskriver egenskaberne af systemet. Dette er en anden måde at betragte sit system, end vi brugte i udledningen af FD-teoremet, som byggede på en række

statistiske antagelser om systemets udvikling. Der er dog overensstemmelse mellem de to betragtningsmåder.

For at vise dette og for at etablere sammenhængen mellem den generelle form af FD-teoremet (ligning 3) og vores system ser vi på den påvirkning, den enkelte ladningsbærer i et amorft stof oplever, når et ydre potentiale lig et ydre felt påtrykkes:

Vi betragter et amorft stof formet som en tynd stang:



Figur D.2. Amorft stof formet som en lang stang.

Følgende størrelser indføres:

N = antallet af ladningsbærere i stoffet.

L = Længden af stoffet.

q_i = ladningen af den i 'te partikel.

$v_i(t)$ = hastigheden af den i 'te partikel.

$r_i(t)$ = stedet af den i 'te partikel.

Vi forudsætter at ladningerne kun kan løbe i en retning, nemlig frem og tilbage ad x -aksen. Strømmen vil være givet ved:

$$f(t) = \frac{\sum_{i=1}^N q_i \cdot v_i(t)}{L} \quad (19)$$

og spændingsforskellen givet ved:

$$e(t) = E(t) \cdot L \quad (20)$$

hvor $E(t)$ er et udefra påtrykt tidsafhængigt elektrisk felt. Feltet forudsættes værende homogent i stoffet.

Vi tilfører systemet et spændingsinput og strømoutputet betragtes. Sammenhængen mellem inputtet og outputtet er ifølge den lineære responsteori givet ved: idet $Y(\tau) = F(\tau)$ og vi substituerer i integralet med $t' = t - \tau$. $F(\tau)$ er den såkaldte lethedsfunktion.

ved Laplace transformationen, og at admitansen (Y) er givet ved integralet af lethedsfunktionen (F).

Ledningsevnen er givet ved realdelen af admitansen. Admitansens sammenhæng med lethedsfunktionen er givet ved:

$$\begin{aligned}
 Y(s) &= \frac{1}{s} F(s) \quad , \quad s = \varepsilon + iw \\
 \updownarrow \\
 Y(s) &= \frac{1}{s} * s \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt \quad (\text{Laplacetransformationen}) \quad (28) \\
 \updownarrow \\
 Y(s) &= \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt
 \end{aligned}$$

hvor Y(s) og F(s) er admitansen og lethedsfunktionen i Laplace planet. F(t) kan ifølge FD-teoremet udtrykkes v.h.a strømfluktationerne i ligevægt :

$$F(t) = \frac{\langle f(0) * f(t) \rangle}{k_1 T} \quad (29)$$

Dette medfører at:

$$\begin{aligned}
 Y(s) &= \frac{1}{k_1 T} \int_0^{\infty} \langle f(0) * f(t) \rangle e^{-st} dt \\
 \updownarrow \\
 Y(s) &= \frac{q'}{L' k_1 T} \int_0^{\infty} \langle v(0) * v(t) \rangle e^{-st} dt
 \end{aligned} \quad (30)$$

...da $f(t) = q * v(t) / L$ (L er en længde, men det er ikke helt klargjort hvad for en længde.)

Ledningsevnen er nu givet ved:

$$\begin{aligned}
 \sigma(\omega) &= \text{Re } Y(s) \quad , \quad \text{for } \varepsilon \rightarrow 0 \\
 \updownarrow \\
 \sigma(\omega) &= \frac{q'}{L' k_1 T} \int_0^{\infty} \langle v(0) * v(t) \rangle \cos(\omega t) dt
 \end{aligned} \quad (31)$$

ved Laplace transformationen, og at admitansen (Y) er givet ved integralet af lethedsfunktionen (F).

Ledningsevnen er givet ved realdelen af admitansen. Admitansens sammenhæng med lethedsfunktionen er givet ved:

$$\begin{aligned}
 Y(s) &= \frac{1}{s} F(s) \quad , \quad s = \varepsilon + iw \\
 \downarrow \\
 Y(s) &= \frac{1}{s} * s \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt \quad (\text{Laplacetransformationen}) \quad (8) \quad (2) \\
 \downarrow \\
 Y(s) &= \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt
 \end{aligned}$$

hvor Y(s) og F(s) er admitansen og lethedsfunktionen i Laplace planet. F(t) kan ifølge FD-teoremets udtrykkes v.h.a strømfluktationerne i ligevægt :

$$F(t) = \frac{\langle f(0) * f(t) \rangle}{k_B T} \quad (29)$$

Dette medfører at:

$$\begin{aligned}
 Y(s) &= \frac{1}{k_B T} \int_0^{\infty} \langle f(0) * f(t) \rangle e^{-st} dt \\
 \downarrow \\
 Y(s) &= \frac{q^2}{L^2 k_B T} \int_0^{\infty} \langle v(0) * v(t) \rangle e^{-st} dt
 \end{aligned} \quad (30)$$

...da $f(t) = q * v(t) / L$ (L er en længde, men det er ikke helt klargjort hvad for en længde.)

Ledningsevnen er nu givet ved:

$$\begin{aligned}
 \sigma(\omega) &= \text{Re } Y(s) \quad , \quad \text{for } \varepsilon \rightarrow 0 \\
 \downarrow \\
 \sigma(\omega) &= \frac{q^2}{L^2 k_B T} \int_0^{\infty} \langle v(0) * v(t) \rangle \cos(\omega t) dt
 \end{aligned} \quad (31)$$

Ved hjælp af Wiener-Khinchins teorem (som vi ikke vil udlede) kan dette omskrives til:

$$\sigma(\omega) = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{q^2}{2L^2 k_B T t'} * \left| \int_0^{t'} v(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \quad (32)$$

Hastigheden af en partikel i en hopmodel er defineret ved:

$$v(t) = \sum_i \Delta r_i \delta(t - \tau_i) \quad (33)$$

... hvor τ_i er tiden for det i 'te hop, og der summeres over alle hop.

Fornuften i denne definition ses ved, at hastigheden er uendelig i det øjeblik ($t=\tau_i$) hvor partiklen hopper, og ellers nul. Ydermere opfylder udtrykket, at hastigheden integreret giver stedet:

$$\begin{aligned} r(t) &= \int_0^t v(t') dt' \quad , \quad r(0) = 0 \\ \downarrow \\ r(t) &= \int_0^t \sum_i \Delta r_i \delta(t' - \tau_i) dt' \\ \downarrow \\ r(t) &= \sum_i \Delta r_i \quad , \quad i \in \{ N \mid 0 \leq \tau_i < t \} \end{aligned} \quad (34)$$

... eller sagt på en anden måde ΔR summeres over alle de hop der foretages i tidsrummet fra 0 til t .

Indsættes dette i udtrykket for ledningsevnen, så får vi:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{q^2}{2L^2 k_B T t'} * \left| \int_0^{t'} \sum_i \Delta r_i \delta(t - \tau_i) e^{i\omega t} dt \right|^2 \quad t' \rightarrow \infty \\ \downarrow \\ \sigma(\omega) &= \frac{q^2}{2L^2 k_B T t'} * \left| \sum_i \Delta r_i e^{i\omega \tau_i} \right|^2 \\ \downarrow \\ \sigma(\omega) &= \frac{q^2}{2L^2 k_B T t'} * \left[\left(\sum_i \Delta r_i \cos(\omega \tau_i) \right)^2 + \left(\sum_i \Delta r_i \sin(\omega \tau_i) \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (35)$$

Hermed er vi nået frem til den form af Kuboformlen, vi anvender i simuleringen.

Kildefortegnelse.

[1] Doi and Edwards. "Theory on Polymer Dynamics", Cambridge University Press.

Appendix E.

Programudskrifter.

Her følger udskrifter af de programmer vi har benyttet til at simulere den frekvensafhængige ledningsevne i uordnede stoffer. Vi har benyttet to forskellige programmer, et til simulation af den én dimensionale model og et til den tre dimensionale.

Program til simulering af den 1-dimensionale model (led_vt.sim).

```
begin
  integer svar;      ! Sørger for, at der kan laves fler simuleringer i ;
  svar:=1;          ! træk, uden at programmet skal genstartes (se sidst ;
  while svar=1 do   ! i denne udskrift, ;
  begin
    procedure inddata;
    begin
      outtext(" Indtast størrelse på gitter (n): "); breakoutimage;
      inimage; n:=inint;
      outtext(" Indtast temperatur (kT): "); breakoutimage;
      inimage; temp:=inreal;
      outtext(" Indtast LOG(Wmin): "); breakoutimage;
      inimage; log_w_min:=inreal;
      outtext(" Indtast deltaLOG(W): "); breakoutimage;
      inimage; delta_log_w:=inreal;
      outtext(" Indtast antal frekvenser: "); breakoutimage;
      inimage; w_antal:=inint;
      w_start:=10**log_w_min;
      w_faktor:=10**delta_log_w;
      outtext(" Skal initialisering af energibarrierer foregå ved:"); outimage;
      outtext("    1) Hele tal"); outimage;
      outtext("    2) Reele tal"); outimage;
      outtext(" Indtast valg (1/2):"); breakoutimage;
      inimage; initmetode:=inint; ! Se procedure init;
      outtext(" Seed for initialisering af energibarrierer (0=clocktime): ");
      breakoutimage;
      inimage; start_seed:=inint;
      if start_seed=0 then start_seed:=mod(clocktime,maxint);
      outtext(" Indtast antal kørsler mellem reinitialisering (-1=ingen): ");
      breakoutimage; inimage; reinit:=inint;
      outtext(" Indtast antal tidsskridt pr. kørsel: "); breakoutimage;
      inimage; max_t:=inint;
      outtext(" Antal koersler: "); breakoutimage;
      inimage; max_koersler:=inint;
```

```

    outtext(" Antal koersler mellem udskrifter: "); breakoutimage;
    inimage; koersler_pr_udskrift:=inint; outimage;
end *** inddata ***;

integer n,w_antal,start_seed,seed,initmetode,reinit,max_t,max_koersler;
integer koersler_pr_udskrift;
real temp,log_w_min,delta_log_w,w_start,w_faktor;

inddata;
begin
    long real array Pv(0:n-1), ln1PvPh(0:n-1), PvM(0:n-1);
    long real array sigma(1:w_antal);
    integer r,deltaR,h,i,j,starttid,koersler,hop;
    long real wdelta_t,rand,w,jw,t,deltaT,index;
    long real array CosSum(1:w_antal),SinSum(1:w_antal);

    procedure init; ! Bestemmer fordelinger af energibarrierer p} gitteret;
    begin          ! og de tilhørende hopsandsynligheder udregnes ;
        integer byt;
        real b,rand;

        if initmetode=2 then
            begin          ! Initialisering med reele tal ;
                for i:=0 step 1 until n-1 do
                    Pv(i):=.5*exp(-uniform(0,1,seed)/temp);
                end;
            if initmetode=1 then
                begin          ! Initialisering med hele tal ;
                    for i:=0 step 1 until n-1 do
                        Pv(i):=i/n;      ! Energibarrierenes størrelser ;
                    for i:=0 step 1 until n-1 do
                        begin          ! Energibarrierene blandes ;
                            byt:=randint(0,n-1,seed);
                            b:=Pv(i);
                            Pv(i):=Pv(byt);
                            Pv(byt):=b;
                        end;
                    for i:=0 step 1 until n-1 do
                        Pv(i):=.5*exp(-Pv(i)/temp);
                    end;
                    ! Ph(i) = Pv(rem(i+1,n)) ;
                    for i:=0 step 1 until n-1 do
                        ln1PvPh(i):=ln(1-Pv(rem(i+1,n))-Pv(i));
                    for i:=0 step 1 until n-1 do
                        PvM(i):=Pv(i)/(Pv(rem(i+1,n))+Pv(i));
                    end *** init ***;

                procedure opdater_sum;

```

```

begin
  w:=w_start;
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  begin
    index:=w*T;
    CosSum(i):=CosSum(i)+deltaR*cos(index);
    SinSum(i):=SinSum(i)+deltaR*sin(index);
    w:=w*w_faktor;
  end;
end *** opdater_Sum ***;

procedure opdater_sigma;
begin
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  begin
    sigma(i):=sigma(i)+(CosSum(i)**2+SinSum(i)**2)/max_t;
    CosSum(i):=0;
    SinSum(i):=0;
  end;
end;

procedure udskriv;
begin
  outint(koersler,6);
  outfix(max_t/(hop+.001),2,6); outint(r,4); ! Hop KAN være nul ;
  for i:=1 step 1 until w_antal do
    outfix(log10(sigma(i)/koersler)+5,2,5);
  if starttid-cputime<>0 then
    outint(koersler*max_t/(cputime-starttid),10);
  outimage;
end *** udskriv ***;

procedure overskrift;
begin
  outtext("n="); outint(n,0);
  outtext(" kT="); outfix(temp,3,6);
  outtext(" max_t="); outint(max_t,0);
  outtext(" initmetode= "); outint(initmetode,2);
  outtext(" reinit= "); outint(reinit,0);
  outtext(" seed= "); outint(start_seed,0);
  outimage;
  outtext("kørsel t/hop r");
  w:=w_start;
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  begin
    outfix(log10(w),2,5);
    w:=w*w_faktor;
  end;

```

```

    outimage;
end *** overskrift ***;

seed:=start_seed; ! Hovedprogrammet ;
init;
seed:=mod(clocktime,maxint);
starttid:=cputime;
overskrift;
for koersler:=1 step 1 until max_koersler do
begin
    t:=0;
    hop:=0;
    deltaR:=0;
    r:=randint(0,n-1,seed); ! Placer partiklen tilfældigt i gitteret ;
    while t<=max_t do
    begin
        ! Foretag et hop ;
        hop:=hop+1;
        opdater_sum;
        deltaT:=ln(uniform(0,1,seed))/ln1PvPh(r);
        if uniform(0,1,seed)<PvM(r) then deltaR:=-1 else deltaR:=1;
        t:=t+deltaT;
        r:=mod(r+deltaR,n);
    end;
    opdater_sigma;
    if mod(koersler,koersler_pr_udskrift)=0 then
    begin
        ! Der er foretaget et hop for meget ;
        hop:=hop-1;
        r:=r-deltaR;
        t:=t-deltaT;
        udskriv;
    end;
    if reinit>0 and then rem(koersler,reinit)=0 then
    begin
        outtext("Reinitialisering"); outimage;
        init;
    end;
    end;
end;
end;
outtext(" Igen ? (1=ja 0=nej)"); breakoutimage;
inimage; svar:=inint;
end;
end;

```

Program til simulering af den 3-dimensionale model (led_vt3d.sim).

```
begin
  integer svar;
  svar:=1;
  while svar=1 do
    begin
      procedure inddata;
      begin
        outtext(" Indtast antal dimension: "); breakoutimage;
        inimage; dim:=inint;
        outtext(" Indtast størrelse på gitter (n): "); breakoutimage;
        inimage; n(1):=inint;
        if dim>=2 then n(2):=n(1) else n(2):=1;
        if dim>=3 then n(3):=n(1) else n(3):=1;
        outtext(" Indtast temperatur (kT): "); breakoutimage;
        inimage; temp:=inreal;
        outtext(" Indtast LOG(Wmin): "); breakoutimage;
        inimage; log_w_min:=inreal;
        outtext(" Indtast deltaLOG(W): "); breakoutimage;
        inimage; delta_log_w:=inreal;
        outtext(" Indtast antal frekvenser: "); breakoutimage;
        inimage; w_antal:=inint;
        w_start:=10**log_w_min;
        w_faktor:=10**delta_log_w;
        outtext(" Skal initialisering af energibarrierer foregå ved:"); outimage;
        outtext("    1) Hele tal"); outimage;
        outtext("    2) Reele tal"); outimage;
        outtext(" Indtast valg (1/2):"); breakoutimage;
        inimage; initmetode:=inint;
        outtext(" Seed for initialisering af energibarrierer (0=clocktime): ");
        breakoutimage;
        inimage; start_seed:=inint;
        if start_seed=0 then start_seed:=mod(clocktime,maxint);
        outtext(" Indtast antal kørsler mellem reinitialisering (-1=ingen): ");
        breakoutimage; inimage; reinit:=inint;
        outtext(" Indtast antal tidsskridt pr. kørsel: "); breakoutimage;
        inimage; max_t:=inint;
        outtext(" Antal koersler: "); breakoutimage;
        inimage; max_koersler:=inint;
        outtext(" Antal koersler mellem udskrifter: "); breakoutimage;
        inimage; koersler_pr_udskrift:=inint; outimage;
      end *** inddata ***;

      integer w_antal,start_seed,seed,initmetode,reinit,max_t,max_koersler;
      integer koersler_pr_udskrift,dim;
      real temp,log_w_min,delta_log_w,w_start,w_faktor;
      integer array n(1:3);
```

```

inndata;
begin
  long real array P(1:6,0:n(1)-1,0:n(2)-1,0:n(3)-1);
  long real array ln1MPHop(0:n(1)-1,0:n(2)-1,0:n(3)-1);
  long real array sigma(1:w_antal);
  integer deltaR,h,i,j,starttid,koersler,hop,d_hop;
  long real wdelta_t,rand,w,jw,t,deltaT,index;
  long real array CosSum(1:dim,1:w_antal),SinSum(1:dim,1:w_antal);
  integer array r(1:3);

  procedure init;
  begin
    integer i1,i2,i3,d,b,byt1,byt2,byt3,bytd;
    long real vaerdi,rand,p_cum;

    if initmetode=2 then
      begin
        for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
          for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
            for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
              for d:=1 step 1 until dim do
                P(d*2-1,i1,i2,i3):=exp(-uniform(0,1,seed)/temp)/dim/2;
              end;
            end;
          end;
        end;
      if initmetode=1 then
        begin
          for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
            for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
              for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
                for d:=1 step 1 until dim do
                  begin
                    P(d*2-1,i1,i2,i3):=b/n(1)/n(2)/n(3)/dim;
                    b:=b+1;
                  end;
                end;
              end;
            end;
          end;
          for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
            for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
              for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
                for d:=1 step 1 until dim do
                  begin
                    byt1:=randint(0,n(1)-1,seed);
                    byt2:=randint(0,n(2)-1,seed);
                    byt3:=randint(0,n(3)-1,seed);
                    bytd:=randint(1,dim,seed);
                    vaerdi:=P(d*2-1,i1,i2,i3);
                    P(d*2-1,i1,i2,i3):=P(bytd*2-1,byt1,byt2,byt3);
                    P(bytd*2-1,byt1,byt2,byt3):=vaerdi;
                  end;
                end;
              end;
            end;
          end;
          for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
            for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do

```

```

    for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
      for d:=1 step 1 until dim do
        P(d*2-1,i1,i2,i3):=exp(-P(d*2-1,i1,i2,i3)/temp)/dim/2;
      end;
    end;

! Indsæt sandsynligheder for hop til "højre". ;
for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
  for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
    for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
      begin
        P(2,i1,i2,i3):=P(1,mod(i1+1,n(1)),i2,i3);
        P(4,i1,i2,i3):=P(3,i1,mod(i2+1,n(2)),i3);
        P(6,i1,i2,i3):=P(5,i1,i2,mod(i3+1,n(3)));
      end;
    end;

! Udregn samlet hopsandsynlighed for hver gitterplads ;
for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
  for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
    for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
      for d:=1 step 1 until 2*dim do
        ln1MPhop(i1,i2,i3):=ln1MPhop(i1,i2,i3)+P(d,i1,i2,i3);
      end;
    end;

! Kummulerede hopsandsynligheder, når der hoppes ;
for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
  for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
    for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
      begin
        p_cum:=0;
        for d:=1 step 1 until 2*dim do
          begin
            p_cum:=p_cum+p(d,i1,i2,i3);
            p(d,i1,i2,i3):=p_cum/ln1MPhop(i1,i2,i3);
          end;
        end;
        if p(dim*2,i1,i2,i3)<>1 then
          begin
            outreal(P(dim*2,i1,i2,i3),5,10);
            outimage;
          end;
        end;
      end;
    end;

! Ventetids "faktoren" ;
for i1:=0 step 1 until n(1)-1 do
  for i2:=0 step 1 until n(2)-1 do
    for i3:=0 step 1 until n(3)-1 do
      ln1MPhop(i1,i2,i3):=ln(1-ln1MPhop(i1,i2,i3));
    end *** init ***;
  end *** init ***;

procedure opdater_sum;

```



```

begin
  w:=w_start;
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  begin
    index:=w*t;
    CosSum(d_hop,i):=CosSum(d_hop,i)+deltaR*cos(index);
    SinSum(d_hop,i):=SinSum(d_hop,i)+deltaR*sin(index);
    w:=w*w_faktor;
  end;
end *** opdater_Sum ***;

```

```

procedure opdater_sigma;
begin
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  for j:=1 step 1 until dim do
  begin
    sigma(i):=sigma(i)+
      (CosSum(j,i)**2+SinSum(j,i)**2)/max_t;
    CosSum(j,i):=0;
    SinSum(j,i):=0;
  end;
end *** opdater_sigma ***;

```

```

procedure udskriv;
begin
  outint(koersler,6);
  outfix(max_t*koersler/(hop+.001),2,6); outint(r(1),4);
  for i:=1 step 1 until w_antal do
    outfix(log10(sigma(i)/koersler/dim)+5,2,5);
  if cputime-starttid<>0 then
    outint(koersler*max_t/(cputime-starttid),10);
  outimage;
end *** udskriv ***;

```

```

procedure overskrift;
begin
  outtext("Dim="); outint(dim,2);
  outtext(" n="); outint(n(1),0);
  outtext(" kT="); outfix(temp,3,6);
  outtext(" max_t="); outint(max_t,0);
  outtext(" initmetode="); outint(initmetode,2);
  outtext(" reinit="); outint(reinit,0);
  outtext(" seed="); outint(start_seed,0);
  outimage;
  outtext("kørsel t/hop r");
  w:=w_start;
  for i:=1 step 1 until w_antal do
  begin

```

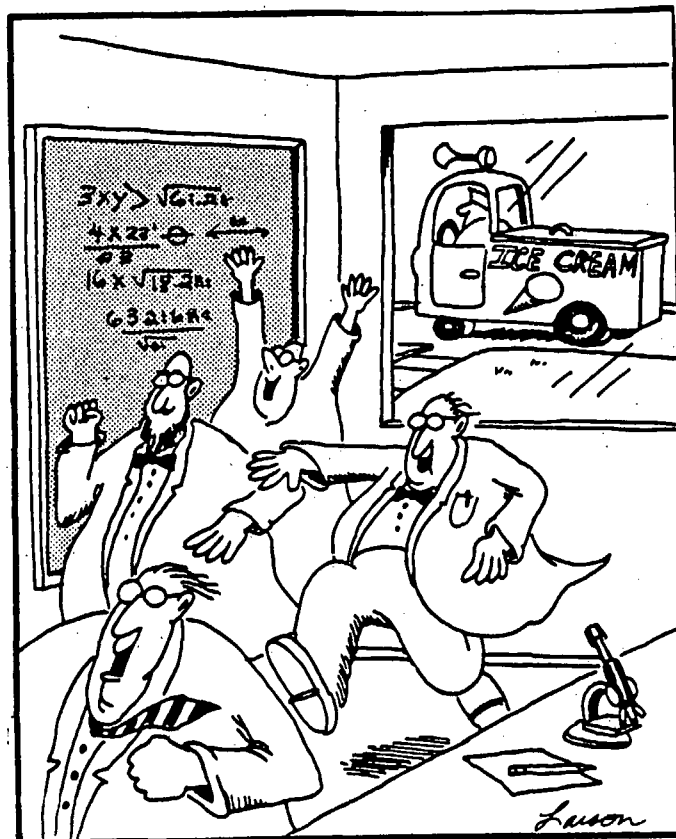
```

        outfix(log10(w),2,5);
        w:=w*w_faktor;
    end;
    outimage;
end *** overskrift ***;

seed:=start_seed;
init;
seed:=mod(clocktime,maxint);
starttid:=cputime;
overskrift;
for koersler:=1 step 1 until max_koersler do
begin
    T:=0;
    deltaR:=0;
    d_hop:=1;
    r(1):=randint(0,n(1)-1,seed);
    r(2):=randint(0,n(2)-1,seed);
    r(3):=randint(0,n(3)-1,seed);
    while t<=max_t do
    begin
        hop:=hop+1;
        opdater_sum;
        deltaT:=ln(uniform(0,1,seed))/ln1MPhop(r(1),r(2),r(3));
        rand:=uniform(0,1,seed);
        d_hop:=1;
        while rand>p(d_hop,r(1),r(2),r(3)) do
            d_hop:=d_hop+1;
            deltaR:=-mod(d_hop,2)*2+1;
            d_hop:=(d_hop+1)//2;
            t:=t+deltaT;
            r(d_hop):=mod(r(d_hop)+deltaR,n(d_hop));
        end;
        opdater_sigma;
        if mod(koersler,koersler_pr_udskrift)=0 then
        begin
            hop:=hop-1;
            t:=t-deltaT;
            r(d_hop):=mod(r(d_hop)-deltaR,n(d_hop));
            udskriv;
        end;
        if reinit>0 and then rem(koersler,reinit)=0 then
        begin
            outtext("Reinitialisering"); outimage;
            init;
        end;
    end;
end;
end;
end;

```

```
outtext(" Igen ? (1=ja 0=nej)"); breakoutimage;  
inimage; svar:=inint;  
end;  
end;
```



- 1/78 "TANKER OM EN PRAKSIS" - et matematikprojekt. Projekt rapport af: Anne Jensen, Lena Lindenskov, Marianne Kesselhahn og Nicolai Lomholt. Vejleder: Anders Madsen
- 2/78 "OPTIMERING" - Menneskets forøgede beherskelsesmuligheder af natur og samfund. Projekt rapport af: Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen, Gert Krenøe og Peter H. Lassen. Vejleder: Bernhelm Boss.
- 3/78 "OPCAVESAMLING", breddekursus i fysik. Af: Lasse Rasmussen, Aage Bonde Kræmmer og Jens Højgaard Jensen.
- 4/78 "TRE ESSAYS" - om matematikundervisning, matematiklæreruddannelsen og videnskabsrindalismen. Af: Mogens Niss. Nr. 4 er p.t. udgået.
- 5/78 "BIBLIOGRAFISK VEJLEDNING til studiet af DEN MODERNE FYSIKS HISTORIE". Af: Helge Kragh. Nr. 5 er p.t. udgået.
- 6/78 "NOGLE ARTIKLER OG DEBATINDLÆG OM - læreruddannelse og undervisning i fysik, og - de naturvidenskabelige fags situation efter studenteroprøret". Af: Karin Beyer, Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 7/78 "MATEMATIKKENS FORHOLD TIL SAMFUNDSØKONOMIEN". Af: B.V. Gnedenko. Nr. 7 er udgået.
- 8/78 "DYNAMIK OG DIAGRAMMER". Introduktion til energy-bond-graph formalismen. Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 9/78 "OM PRAKSIS' INDFLYDELSE PÅ MATEMATIKKENS UDVIKLING". - Motiver til Kepler's: "Nova Stereometria Doliorum Vinarium". Projekt rapport af: Lasse Rasmussen. Vejleder: Anders Madsen.
-
- 10/79 "TERMODYNAMIK I GYMNASIET". Projekt rapport af: Jan Christensen og Jeanne Mortensen. Vejledere: Karin Beyer og Peder Voetmann Christiansen.
- 11/79 "STATISTISKE MATERIALER". Af: Jørgen Larsen.
- 12/79 "LINEÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER OG DIFFERENTIALLIGNINGSSYSTEMER". Af: Mogens Brun Heefelt. Nr. 12 er udgået.
- 13/79 "CAVENDISH'S FORSØG I GYMNASIET". Projekt rapport af: Gert Krenøe. Vejleder: Albert Chr. Paulsen.
- 14/79 "BOOKS ABOUT MATHEMATICS: History, Philosophy, Education, Models, System Theory, and Works of". Af: Else Høyrup. Nr. 14 er p.t. udgået.
- 15/79 "STRUKTUREL STABILITET OG KATASTROFER i systemer i og udenfor termodynamisk ligevægt". Specialeopgave af: Leif S. Striegler. Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
- 16/79 "STATISTIK I KRÆFTFORSKNINGEN". Projekt rapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen. Vejleder: Jørgen Larsen.
- 17/79 "AT SPØRGE OG AT SVARE i fysikundervisningen". Af: Albert Christian Paulsen.
- 18/79 "MATHEMATICS AND THE REAL WORLD", Proceedings af an International Workshop, Roskilde University Centre, Denmark, 1978. Preprint. Af: Bernhelm Booss og Mogens Niss (eds.)
- 19/79 "GEOMETRI, SKOLE OG VIRKELIGHED". Projekt rapport af: Tom J. Andersen, Tommy B. Andersen og Per H.H. Larsen. Vejleder: Mogens Niss.
- 20/79 "STATISTISKE MODELLER TIL BESTEMMELSE AF SIKRE DOSER FOR CARCINOGENE STOFFER". Projekt rapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen. Vejleder: Jørgen Larsen.
- 21/79 "KONTROL I GYMNASIET-FORMAL OG KONSEKVENSER". Projekt rapport af: Crilles Bacher, Per S. Jensen, Preben Jensen og Torben Nysteen.
- 22/79 "SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (1)". 1-port lineært response og støj i fysikken. Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 23/79 "ON THE HISTORY OF EARLY WAVE MECHANICS - with special emphasis on the role of reality". Af: Helge Kragh.
-
- 24/80 "MATEMATIKOPFATTELSE HOS 2.C'ERE". a+b 1. En analyse. 2. Interviewmateriale. Projekt rapport af: Jan Christensen og Knud Lindhardt Rasmussen. Vejleder: Mogens Niss.
- 25/80 "EKSAMENSOPGAVER", Dybdemodulet/fysik 1974-79.
- 26/80 "OM MATEMATISKE MODELLER". En projekt rapport og to artikler. Af: Jens Højgaard Jensen m.fl.
- 27/80 "METHODOLOGY AND PHILOSOPHY OF SCIENCE IN PAUL DIRAC'S PHYSICS". Af: Helge Kragh.
- 28/80 "DILEMMAET I RELAXATION" - et forslag til en ny model bygget på væskernes viscoelastiske egenskaber". Projekt rapport af: Gert Krenøe. Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 29/80 "ODIN - undervisningsmateriale til et kursus i differentiaalligningsmodeller". Projekt rapport af: Tommy R. Andersen, Per H.H. Larsen og Peter H. Lassen. Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 30/80 "FUSIONSENERGIEN - - - ATOMSAMFUNDETS ENDESTATION". Af: Oluf Danielsen. Nr. 30 er udgået.
- 31/80 "VIDENSKABSTEORETISKE PROBLEMER VED UNDERVISNINGSSYSTEMER BASERET PÅ MÆNGDELÆRE". Projekt rapport af: Troels Lange og Jørgen Karrebæk. Vejleder: Stig Andur Pedersen. Nr. 31 er p.t. udgået.
- 32/80 "POLYMERE STOFFERS VISCOELASTISKE EGENSKABER - BELYST VED HJÆLP AF MEKANISKE IMPEDANSMÅLINGER - OG MØSSBAUEREFFEKT MÅLINGER". Projekt rapport af: Crilles Bacher og Preben Jensen. Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.
- 33/80 "KONSTITUERING AF FAG INDEN FOR TEKNISK - NATURVIDENSKABELIGE UDDANNELSER. I-II". Af: Arne Jakobsen.
- 34/80 "ENVIRONMENTAL IMPACT OF WIND ENERGY UTILIZATION". ENERGY SERIES NO. I. Af: Bent Sørensen. Nr. 34 er udgået.

- 35/80 "HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE ATOMFYSIKS UDVIKLING".
Af: Helge Kragh.
- 36/80 "HVAD ER MENINGEN MED MATEMATIKUNDERVISNINGEN?".
Fire artikler.
Af: Mogens Niss.
- 37/80 "RENEWABLE ENERGY AND ENERGY STORAGE".
ENERGY SERIES NO. 2.
Af: Bent Sørensen.
-
- 38/81 "TIL EN HISTORIE TEORI OM NATURERKENDELSE, TEKNOLOGI OG SAMFUND".
Projektrapport af: Erik Gade, Hans Hedal, Henrik Lau og Finn Physant.
Vejledere: Stig Andur Pedersen, Helge Kragh og Ib Thiersen.
Nr. 38 er p.t. udgæet.
- 39/81 "TIL KRITIKKEN AF VÆKSTØKONOMIEN".
Af: Jens Højgaard Jensen.
- 40/81 "TELEKOMMUNIKATION I DANMARK - oplæg til en teknologivurdering".
Projektrapport af: Arne Jørgensen, Bruno Petersen og Jan Vedde.
Vejleder: Per Nørgaard.
- 41/81 "PLANNING AND POLICY CONSIDERATIONS RELATED TO THE INTRODUCTION OF RENEWABLE ENERGY SOURCES INTO ENERGY SUPPLY SYSTEMS".
ENERGY SERIES NO. 3.
Af: Bent Sørensen.
- 42/81 "VIDENSKAB TEORI SAMFUND - En introduktion til materialistiske videnskabsopfattelser".
Af: Helge Kragh og Stig Andur Pedersen.
- 43/81 1. "COMPARATIVE RISK ASSESSMENT OF TOTAL ENERGY SYSTEMS".
2. "ADVANTAGES AND DISADVANTAGES OF DECENTRALIZATION".
ENERGY SERIES NO. 4.
Af: Bent Sørensen.
- 44/81 "HISTORISKE UNDERSØGELSER AF DE EKSPERIMENTELLE FORUDSÆTNINGER FOR RUTHERFORDS ATOMMODEL".
Projektrapport af: Niels Thor Nielsen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
-
- 45/82 Er aldrig udkommet.
- 46/82 "EKSEMPLARISK UNDERVISNING OG FYSISK ERKENDELSE-1+11 ILLUSTRERET VED TO EKSEMPLER".
Projektrapport af: Torben O. Olsen, Lasse Rasmussen og Niels Dreyer Sørensen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
- 47/82 "BARSEBÅK OG DET VÆRST OFFICIELT-DØNNELIGE UHELD".
ENERGY SERIES NO. 5.
Af: Bent Sørensen.
- 48/82 "EN UNDERSØGELSE AF MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ ADGANGSKURSUS TIL KØBENHAVNS TEKNIKUM".
Projektrapport af: Lis Eilertzen, Jørgen Karrebæk, Troels Lange, Preben Nørregaard, Lissi Pedersen, Laust Rishøj, Lill Røn og Isac Showiki.
Vejleder: Mogens Niss.
- 49/82 "ANALYSE AF MULTISPEKTRALE SATELLITBILLEDER".
Projektrapport af: Preben Nørregaard.
Vejledere: Jørgen Larsen og Rasmus Ole Rasmussen.
- 50/82 "HERSLEV - MULIGHEDER FOR VEDVARENDE ENERGI I EN LANDSBY".
ENERGY SERIES NO. 6.
Rapport af: Bent Christensen, Bent Hove Jensen, Dennis B. Møller, Bjarne Laursen, Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 51/82 "HVAD KAN DER GØRES FOR AT AFHJÆLPE PIGERS BLOKERING OVERFOR MATEMATIK?".
Projektrapport af: Lis Eilertzen, Lissi Pedersen, Lill Røn og Susanne Stender.
- 52/82 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS".
Af: Bernhelm Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 53/82 "THE CONSTITUTION OF SUBJECTS IN ENGINEERING EDUCATION".
Af: Arne Jacobsen og Stig Andur Pedersen.
- 54/82 "FUTURES RESEARCH" - A Philosophical Analysis of Its Subject-Matter and Methods.
Af: Stig Andur Pedersen og Johannes Witt-Hansen.
- 55/82 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.
En biografi.
Af: Else Høytrup.

Vedr. tekst nr. 55/82 se også tekst nr. 62/83.
- 56/82 "EN - TO - MANGE" -
En undersøgelse af matematisk økologi.
Projektrapport af: Troels Lange.
Vejleder: Anders Madsen.
-
- 57/83 "ASPECT EKSPERIMENTET"-
Skjulte variable i kvantemekanikken?
Projektrapport af: Tom Juul Andersen.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
Nr. 57 er udgæet.
- 58/83 "MATEMATISKE VANDRINGER" - Modelbetragtninger over spredning af dyr mellem småbiotoper i agerlandet.
Projektrapport af: Per Hammershøj Jensen og Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 59/83 "THE METHODOLOGY OF ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES NO. 7.
Af: Bent Sørensen.
- 60/83 "MATEMATISK MODEKSPERTISE"- et eksempel.
Projektrapport af: Erik O. Gade, Jørgen Karrebæk og Preben Nørregaard.
Vejleder: Anders Madsen.
- 61/83 "FYSIKS IDEOLOGISKE FUNKTION, SOM ET EKSEMPEL PÅ EN NATURVIDENSKAB - HISTORISK SET".
Projektrapport af: Annette Post Nielsen.
Vejledere: Jens Høytrup, Jens Højgaard Jensen og Jørgen Vogelius.
- 62/83 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.
En biografi 2. rev. udgave.
Af: Else Høytrup.
- 63/83 "CREATING ENERGY FUTURES: A SHORT GUIDE TO ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES NO. 8.
Af: David Crossley og Bent Sørensen.
- 64/83 "VON MATEMATIK UND KRIEG".
Af: Bernhelm Booss og Jens Høytrup.
- 65/83 "ANVENDT MATEMATIK - TEORI ELLER PRAKSIS".
Projektrapport af: Per Hedegård Andersen, Kirsten Habekost, Carsten Holst-Jensen, Annelise von Moos, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
Vejledere: Bernhelm Booss og Klaus Grünbaum.
- 66/83 "MATEMATISKE MODELLER FOR PERIODISK SELEKTION I ESCHERICHIA COLI".
Projektrapport af: Hanne Lisbet Andersen, Ole Richard Jensen og Klavs Frisdahl.
Vejledere: Jørgen Larsen og Anders Hede Madsen.
- 67/83 "ELEPSOIDE METODEN - EN NY METODE TIL LINEÆR PROGRAMMERING?".
Projektrapport af: Lone Billmann og Lars Boye.
Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 68/83 "STOKASTISKE MODELLER I POPULATIONSGENETIK" - til kritikken af teoriladede modeller.
Projektrapport af: Lise Odgård Gade, Susanne Hansen, Michael Hviid og Frank Mølgård Olsen.
Vejleder: Jørgen Larsen.

- 69/83 "ELEVFORUDSÆTNINGER I FYSIK"
- en test i l.g med kommentarer.
Af: Albert C. Paulsen.
- 70/83 "INDLÆRINGS - OG FORMIDLINGSPROBLEMER I MATEMATIK PÅ VOKSENUNDERVISNINGSNIVEAU".
Projektrapport af: Hanne Lisbet Andersen, Torben J. Andreasen, Svend Åge Houmann, Helle Glerup Jensen, Keld Fl. Nielsen, Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Klaus Grünbaum og Anders Hede Madsen.
- 71/83 "PIGER OG FYSIK"
- et problem og en udfordring for skolen?
Af: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich og Mette Vedelsby.
- 72/83 "VERDEN IFVLGE PEIRCE" - to metafysiske essays, om og af C.S Peirce.
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 73/83 "EN ENERGIANALYSE AF LANDEFUG" - økologisk contra traditionelt.
ENERGY SERIES NO. 9
Specialeopgave i fysik af: Bent Hove Jensen.
Vejleder: Bent Sørensen.
-
- 74/84 "MINIATURISERING AF MIKROELEKTRONIK" - om videnskabeliggjort teknologi og nytten af at lære fysik.
Projektrapport af: Bodil Harder og Linda Szkotak Jensen.
Vejledere: Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 75/84 "MATEMATIKUNDERVISNINGEN I FREMTIDENS GYMNASIUM" - Case: Lineær programmering.
Projektrapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank Mølgaard Olsen.
Vejledere: Mogens Brun Heefelt og Jens Bjørneboe.
- 76/84 "KERNEKRAFT I DANMARK?" - Et høringsvar indkaldt af miljøministeriet, med kritik af miljøstyrelsens rapporter af 15. marts 1984.
ENERGY SERIES No. 10
Af: Niels Boye Olsen og Bent Sørensen.
- 77/84 "POLITISKE INDEKS - FUP ELLER FAKTA?"
Opinionsundersøgelser belyst ved statistiske modeller.
Projektrapport af: Svend Åge Houmann, Keld Nielsen og Susanne Stender.
Vejledere: Jørgen Larsen og Jens Bjørneboe.
- 78/84 "JEVNSTRØMSLEDNINGSEVNE OG GITTERSTRUKTUR I AMORFT GERMANIUM".
Specialrapport af: Hans Heddal, Frank C. Ludvigsen og Finn C. Physant.
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 79/84 "MATEMATIK OG ALMENDANNELSE".
Projektrapport af: Henrik Coster, Mikael Wennerberg Johansen, Povl Kattler, Birgitte Lydholm og Morten Overgaard Nielsen.
Vejleder: Bernhard Booss.
- 80/84 "KURSUSMATERIALE TIL MATEMATIK B".
Af: Mogens Brun Heefelt.
- 81/84 "FREKVENSafhængig LEDNINGSEVNE I AMORFT GERMANIUM".
Specialrapport af: Jørgen Wind Petersen og Jan Christensen.
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 82/84 "MATEMATIK - OG FYSIKUNDERVISNINGEN I DET AUTOMATISEREDE SAMFUND".
Rapport fra et seminar afholdt i Hvidovre 25-27 april 1983.
Red.: Jens Højgaard Jensen, Bent C. Jørgensen og Mogens Niss.
- 83/84 "ON THE QUANTIFICATION OF SECURITY":
PEACE RESEARCH SERIES NO. 1
Af: Bent Sørensen
nr. 83 er p.t. udgået
- 84/84 "NOGLE ARTIKLER OM MATEMATIK, FYSIK OG ALMENDANNELSE".
Af: Jens Højgaard Jensen, Mogens Niss m. fl.
- 85/84 "CENTRIFUGALREGULATORER OG MATEMATIK".
Specialrapport af: Per Hødegård Andersen, Carsten Holst-Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 86/84 "SECURITY IMPLICATIONS OF ALTERNATIVE DEFENSE OPTIONS FOR WESTERN EUROPE".
PEACE RESEARCH SERIES NO. 2
Af: Bent Sørensen.
- 87/84 "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY IN DISORDERED SOLIDS".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 88/84 "RISE, FALL AND RESURRECTION OF INFINITESIMALS".
Af: Detlef Laugwitz.
- 89/84 "FUERNVARMOPTIMERING".
Af: Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
- 90/84 "ENERGI I L.G - EN TEORI FOR TILRETTELÆGGELSE".
Af: Albert Chr. Paulsen.
-
- 91/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".
1. Lærervejledning
Projektrapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.
Vejleder: Torsten Meyer.
- 92/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".
2. Materiale
Projektrapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.
Vejleder: Torsten Meyer.
- 93/85 "THE SEMIOTICS OF QUANTUM - NON - LOCALITY".
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 94/85 "TREENIGHEDEN BOURBAKI - generalen, matematikeren og ånden".
Projektrapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank M. Olsen.
Vejleder: Mogens Niss.
- 95/85 "AN ALTERNATIVE DEFENSE PLAN FOR WESTERN EUROPE".
PEACE RESEARCH SERIES NO. 3
Af: Bent Sørensen
- 96/85 "ASPEKTER VED KRAFTVARMEFORSYNING".
Af: Bjarne Lillethorup.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 97/85 "ON THE PHYSICS OF A.C. HOPPING CONDUCTIVITY".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 98/85 "VALGMULIGHEDER I INFORMATIONSAlderEN".
Af: Bent Sørensen.
- 99/85 "Der er langt fra Q til R".
Projektrapport af: Niels Jørgensen og Mikael Klintorp.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 100/85 "TALSISTEMETS OPBYGNING".
Af: Mogens Niss.
- 101/85 "EXTENDED MOMENTUM THEORY FOR WINDMILLS IN PERIURBATIVE FORM".
Af: Ganesh Sengupta.
- 102/85 OPSTILLING OG ANALYSE AF MATEMATISKE MODELLER, BELYST VED MODELLER OVER KØERS FODEROPTAGELSE OG - OMSÆTNING".
Projektrapport af: Lis Ellertzen, Kirsten Habekost, Lilli Røn og Susanne Stender.
Vejleder: Klaus Grünbaum.

- 103/85 "ØSLE KOLDKRIGERE OG VIDENSKABENS LYSE IDEER".
Projekt rapport af: Niels Ole Dam og Kurt Jensen.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 104/85 "ANALOGREGNEMASKINEN OG LORENZLIGNINGER".
Af: Jens Jøger.
- 105/85 "THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE SPECIFIC HEAT OF THE GLASS REANITION".
Af: Tage Christensen.
- "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY".
Af: Jeppe C. Dyre.
Contributions to the Third International Conference on the Structure of Non - Crystalline Materials held in Grenoble July 1985.
- 106/85 "QUANTUM THEORY OF EXTENDED PARTICLES".
Af: Bent Sørensen.
- 107/85 "EN MYG GÅR INGEN EPIDEMI".
- floedblindhed som eksempel på matematisk modellering af et epidemiologisk problem.
Projekt rapport af: Per Hedegård Andersen, Lars Boye, Carsten Holst Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
Vejleder: Jesper Larsen.
- 108/85 "APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM" - state and trends -
Af: Mogens Niss.
- 109/85 "COX I STUDIETIDEN" - Cox's regressionsmodel anvendt på studenteroplysninger fra RUC.
Projekt rapport af: Mikael Wemmerberg Johansen, Poul Kattler og Torben J. Andreasen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 110/85 "PLANNING FOR SECURITY".
Af: Bent Sørensen
- 111/85 "JORDEN RUNDT PÅ FLADE KORT".
Projekt rapport af: Birgit Andresen, Beatriz Quinones og Jimmy Staal.
Vejleder: Mogens Niss.
- 112/85 "VIDENSKABELIGGØRELSE AF DANSK TEKNOLOGISK INNOVATION FØR TIL 1950 - BELYST VED EKSEMPLER".
Projekt rapport af: Erik Odgaard Gade, Hans Hedal, Frank C. Ludvigsen, Annette Post Nielsen og Finn Physant.
Vejleder: Claus Bryld og Bent C. Jørgensen.
- 113/85 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS II".
Af: Bernhelm Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 114/85 "ANVENDELSE AF GRAFISKE METODER TIL ANALYSE AF KONTIGENTABELLER".
Projekt rapport af: Lone Billmann, Ole R. Jensen og Arne-Lise von Moos.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 115/85 "MATEMATIKKENS UDVIKLING OP TIL RENESSANSEN".
Af: Mogens Niss.
- 116/85 "A PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR THE MEYER-NELDEL RULE".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 117/85 "KRAFT & FJERNVARMEOPTIMERING".
Af: Jacob Mørch Pedersen.
Vejleder: Bent Sørensen
- 118/85 "TILFÆLDIGHEDEN OG NØDVENDIGHEDEN IFØLGE PEIRCE OG FYSIKKEN".
Af: Peder Voetmann Christiansen
- 120/86 "ET ANTAL STATISTISKE STANDARDMODELLER".
Af: Jørgen Larsen
- 121/86 "SIMULATION I KONTINUERT TID".
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 122/86 "ON THE MECHANISM OF GLASS IONIC CONDUCTIVITY".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 123/86 "GYMNASIEFYSIKKEN OG DEN STORE VERDEN".
Fysiklærerforeningen, DMFUA, RUC.
- 124/86 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK".
Samtlige opgaver stillet i tiden 1974-jan. 1986.
- 125/86 "UVBY, 8 - systemet - en effektiv fotometrisk spektral-klassifikation af B-, A- og F-stjerner".
Projekt rapport af: Birger Lundgren.
- 126/86 "OM UDVIKLINGEN AF DEN SPECIELLE RELATIVITETSTEORI".
Projekt rapport af: Lise Odgaard & Linda Szkotak Jensen
Vejledere: Karin Beyer & Stig Andur Pedersen.
- 127/86 "GALOIS' BIDRAG TIL UDVIKLINGEN AF DEN ABSTRAKTE ALGEBRA".
Projekt rapport af: Pernille Sand, Heine Larsen & Lars Frandsen.
Vejleder: Mogens Niss.
- 128/86 "SMÅKRYB" - om ikke-standard analyse.
Projekt rapport af: Niels Jørgensen & Mikael Klintorp.
Vejleder: Jeppe Dyre.
- 129/86 "PHYSICS IN SOCIETY"
Lecture Notes 1983 (1986)
Af: Bent Sørensen
- 130/86 "Studies in Wind Power"
Af: Bent Sørensen
- 131/86 "FYSIK OG SAMFUND" - Et integreret fysik/historie-projekt om naturanskuelsens historiske udvikling og dens samfundsmæssige betingethed.
Projekt rapport af: Jakob Heckscher, Søren Brønd, Andy Wierød.
Vejledere: Jens Høyrup, Jørgen Vogelius, Jens Højgaard Jensen.
- 132/86 "FYSIK OG DANNEELSE"
Projekt rapport af: Søren Brønd, Andy Wierød.
Vejledere: Karin Beyer, Jørgen Vogelius.
- 133/86 "CHERNOBYL ACCIDENT: ASSESSING THE DATA. ENERGY SERIES NO. 15."
AF: Bent Sørensen.
-
- 134/87 "THE D.C. AND THE A.C. ELECTRICAL TRANSPORT IN AsSeTe SYSTEM".
Authors: M.B.El-Den, N.B.Olsen, Ib Høst Pedersen, Petr Visčor
- 135/87 "INTUITIONISTISK MATEMATIKS METODER OG ERKENDELSESTEORETISKE FORUDSÆTNINGER".
MATEMATIKSPECIALE: Claus Larsen
Vejledere: Anton Jensen og Stig Andur Pedersen
- 136/87 "Mystisk og naturlig filosofi: En skitse af kristendommens første og andet møde med græsk filosofi".
Projekt rapport af Frank Colding Ludvigsen
Vejledere: Historie: Ib Thiersen
Fysik: Jens Højgaard Jensen
- 137/87 "HOPMODELLER FOR ELEKTRISK LEDNING I UORDNEDE FASTE STOFFER" - Resume af licentiatforhandling
Af: Jeppe Dyre
Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.
- 119/86 "DET ER GANSKE VIST - - EUKLIDS FEMTE POSTULAT KUNNE NOK SKABE RØRE I ANDEDAMMEN".
Af: Iben Maj Christiansen
Vejleder: Mogens Niss.

- 138/87 "JOSEPHSON EFFECT AND CIRCLE MAP."
Paper presented at The International Workshop on Teaching Nonlinear Phenomena at Universities and Schools, "Chaos in Education". Balaton, Hungary, 26 April-2 May 1987.
By: Peder Voetmann Christiansen
- 139/87 "Machbarkeit nichtbeherrschbarer Technik durch Fortschritte in der Erkennbarkeit der Natur"
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek
Martin Bohle-Carbonell
- 140/87 "ON THE TOPOLOGY OF SPACES OF HOLOMORPHIC MAPS"
By: Jens Gravesen
- 141/87 "RADIOMETERS UDVIKLING AF BLODGASAPPARATUR - ET TEKNOLOGIHISTORISK PROJEKT"
Projektrapport af Finn C. Physant
Vejleder: Ib Thiersen
- 142/87 "The Calderón Projektor for Operators With Splitting Elliptic Symbols"
by: Bernhelm Booss-Bavnbek og
Krzysztof P. Wojciechowski
- 143/87 "Kursusmateriale til Matematik på NAT-BAS"
af: Mogens Brun Heefelt
- 144/87 "Context and Non-Locality - A Peircean Approach"
Paper presented at the Symposium on the Foundations of Modern Physics The Copenhagen Interpretation 60 Years after the Como Lecture. Joensuu, Finland, 6 - 8 august 1987.
By: Peder Voetmann Christiansen
- 145/87 "AIMS AND SCOPE OF APPLICATIONS AND MODELLING IN MATHEMATICS CURRICULA"
Manuscript of a plenary lecture delivered at ICMTA 3, Kassel, FRG 8.-11.9.1987
By: Mogens Niss
- 146/87 "BESTEMMELSE AF BULKRESISTIVITETEN I SILICIUM"
- en ny frekvensbaseret målemetode.
Fysikspeciale af Jan Vedde
Vejledere: Niels Boye Olsen & Petr Višćor
- 147/87 "Rapport om BIS på NAT-BAS"
redigeret af: Mogens Brun Heefelt
- 148/87 "Naturvidenskabsundervisning med Samfundsperspektiv"
af: Peter Colding-Jørgensen DLH
Albert Chr. Paulsen
- 149/87 "In-Situ Measurements of the density of amorphous germanium prepared in ultra high vacuum"
by: Petr Višćor
- 150/87 "Structure and the Existence of the first sharp diffraction peak in amorphous germanium prepared in UHV and measured in-situ"
by: Petr Višćor
- 151/87 "DYNAMISK PROGRAMMERING"
Matematikprojekt af:
Birgit Andresen, Keld Nielsen og Jimmy Staal
Vejleder: Mogens Niss
- 152/87 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PROJECTIONS AND THE TOPOLOGY OF CERTAIN SPACES OF ELLIPTIC BOUNDARY VALUE PROBLEMS"
by: Bernhelm Booss-Bavnbek
Krzysztof P. Wojciechowski
- 153/88 "HALVLEDERTEKNOLOGIENS UDVIKLING MELLEM MILITÆRE OG CIVILE KRÆFTER"
Et eksempel på humanistisk teknologihistorie
Historiespeciale
Af: Hans Hedal
Vejleder: Ib Thiersen
- 154/88 "MASTER EQUATION APPROACH TO VISCOUS LIQUIDS AND THE GLASS TRANSITION"
By: Jeppe Dyre
- 155/88 "A NOTE ON THE ACTION OF THE POISSON SOLUTION OPERATOR TO THE DIRICHLET PROBLEM FOR A FORMALLY SELFADJOINT DIFFERENTIAL OPERATOR"
by: Michael Pedersen
- 156/88 "THE RANDOM FREE ENERGY BARRIER MODEL FOR AC CONDUCTION IN DISORDERED SOLIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 157/88 "STABILIZATION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS BY FINITE DIMENSIONAL BOUNDARY FEEDBACK CONTROL: A pseudo-differential approach."
by: Michael Pedersen
- 158/88 "UNIFIED FORMALISM FOR EXCESS CURRENT NOISE IN RANDOM WALK MODELS"
by: Jeppe Dyre
- 159/88 "STUDIES IN SOLAR ENERGY"
by: Bent Sørensen
- 160/88 "LOOP GROUPS AND INSTANTONS IN DIMENSION TWO"
by: Jens Gravesen
- 161/88 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PERTURBATIONS AND STABILIZATION OF DISTRIBUTED PARAMETER SYSTEMS: Dirichlet feedback control problems"
by: Michael Pedersen
- 162/88 "PIGER & FYSIK - OG MEGET MERE"
Af: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich, Mette Vedelsby
- 163/88 "EN MATEMATISK MODEL TIL BESTEMMELSE AF PERMEABILITETEN FOR BLOD-NETHINDE-BARRIEREN"
Af: Finn Langberg, Michael Jarden, Lars Frellesen
Vejleder: Jesper Larsen
- 164/88 "Vurdering af matematisk teknologi
Technology Assessment
Technikfolgenabschätzung"
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek, Glen Pate med
Martin Bohle-Carbonell og Jens Højgaard Jensen
- 165/88 "COMPLEX STRUCTURES IN THE NASH-MOSER CATEGORY"
by: Jens Gravesen

- 166/88 "Grundbegreber i Sandsynlighedsregningen"
Af: Jørgen Larsen
- 167a/88 "BASISSTATISTIK 1. Diskrete modeller"
Af: Jørgen Larsen
- 167b/88 "BASISSTATISTIK 2. Kontinuerte modeller"
Af: Jørgen Larsen
- 168/88 "OVERFLADEN AF PLANETEN MARS"
Laboratorie-simulering og MARS-analøger undersøgt ved Mössbauerspektroskopi.
Fysikspeciale af:
Birger Lundgren
Vejleder: Jens Martin Knudsen
Fys.Lab./HCØ
- 169/88 "CHARLES S. PEIRCE: MURSTEN OG MØRTEL TIL EN METAFYSIK."
Fem artikler fra tidsskriftet "The Monist" 1891-93.
Introduktion og oversættelse:
Peder Voetmann Christiansen
- 170/88 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK"
Samtlige opgaver stillet i tiden 1974 - juni 1988
- 171/88 "The Dirac Equation with Light-Cone Data"
af: Johnny Tom Ottesen
- 172/88 "FYSIK OG VIRKELIGHED"
Kvantemekanikkens grundlagsproblem i gymnasiet.
Fysikprojekt af:
Erik Lund og Kurt Jensen
Vejledere: Albert Chr. Paulsen og Peder Voetmann Christiansen
-
- 173/89 "NUMERISKE ALGORITMER"
af: Mogens Brun Heefelt
- 174/89 "GRAFISK FREMSTILLING AF FRAKTALER OG KAOS"
af: Peder Voetmann Christiansen
- 175/89 "AN ELEMENTARY ANALYSIS OF THE TIME DEPENDENT SPECTRUM OF THE NON-STATIONARY SOLUTION TO THE OPERATOR RICCATI EQUATION"
af: Michael Pedersen
- 176/89 "A MAXIMUM ENTROPY ANSATZ FOR NONLINEAR RESPONSE THEORY"
af: Jeppe Dyre
- 177/89 "HVAD SKAL ADAM STÅ MODEL TIL"
af: Morten Andersen, Ulla Engström, Thomas Gravesen, Nanna Lund, Pia Madsen, Dina Rawat, Peter Torstensen
Vejleder: Mogens Brun Heefelt
- 178/89 "BIOSYNTESSEN AF PENICILLIN - en matematisk model"
af: Ulla Eghave Rasmussen, Hans Oxvang Mortensen, Michael Jarden
vejleder i matematik: Jesper Larsen
biologi: Erling Lauridsen
- 179a/89 "LÆRERVEJLEDNING M.M. til et eksperimentelt forløb om kaos"
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen
Karin Beyer
- 179b/89 "ELEVHEFTE: Noter til et eksperimentelt kursus om kaos"
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen
Karin Beyer
- 180/89 "KAOS I FYSISKE SYSTEMER eksemplificeret ved torsions- og dobbeltpendul".
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 181/89 "A ZERO-PARAMETER CONSTITUTIVE RELATION FOR PURE SHEAR VISCOELASTICITY"
by: Jeppe Dyre
- 183/89 "MATHEMATICAL PROBLEM SOLVING, MODELLING. APPLICATIONS AND LINKS TO OTHER SUBJECTS - State. trends and issues in mathematics instruction
by: WERNER BLUM, Kassel (FRG) og MOGENS NISS, Roskilde (Denmark)
- 184/89 "En metode til bestemmelse af den frekvensafhængige varmfyldelse af en underafkølet væske ved glasovergangen"
af: Tage Emil Christensen
-
- 185/90 "EN NÆSTEN PERIODISK HISTORIE"
Et matematisk projekt
af: Steen Grode og Thomas Jessen
Vejleder: Jacob Jacobsen
- 186/90 "RITUAL OG RATIONALITET i videnskabers udvikling"
redigeret af Arne Jakobsen og Stig Andur Pedersen
- 187/90 "RSA - et kryptografisk system"
af: Annetette Sofie Olufsen, Lars Frellesen og Ole Møller Nielsen
Vejledere: Michael Pedersen og Finn Munk
- 188/90 "FERMICONDENSATION - AN ALMOST IDEAL GLASS TRANSITION"
by: Jeppe Dyre
- 189/90 "DATAMATER I MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ GYMNASIET OG HØJERE LÆREANSTALTER
af: Finn Langberg

- 190/90 "FIVE REQUIREMENTS FOR AN APPROXIMATE NONLINEAR RESPONSE THEORY"
by: Jeppe Dyre
- 191/90 "MOORE COHOMOLOGY, PRINCIPAL BUNDLES AND ACTIONS OF GROUPS ON C^* -ALGEBRAS"
by: Iain Raeburn and Dana P. Williams
- 192/90 "Age-dependent host mortality in the dynamics of endemic infectious diseases and SIR-models of the epidemiology and natural selection of co-circulating influenza virus with partial cross-immunity"
by: Viggo Andreasen
- 193/90 "Causal and Diagnostic Reasoning"
by: Stig Andur Pedersen
- 194a/90 "DETERMINISTISK KAOS"
Projektrapport af : Frank Olsen
- 194b/90 "DETERMINISTISK KAOS"
Kørselsrapport
Projektrapport af: Frank Olsen
- 195/90 "STADIER PÅ PARADIGMETS VEJ"
Et projekt om den videnskabelige udvikling der førte til dannelse af kvantemekanikken.
Projektrapport for 1. modul på fysikuddannelsen, skrevet af:
Anja Boisen, Thomas Hougård, Anders Gorm Larsen, Nicolai Ryge.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 196/90 "ER KAOS NØDVENDIGT?"
- en projektrapport om kaos' paradigmatiske status i fysikken.
af: Johannes K. Nielsen, Jimmy Staal og Peter Bøggild
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 197/90 "Kontrafaktiske konditionaler i HOL"
af: Jesper Voetmann, Hans Oxvang Mortensen og Aleksander Høst-Madsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 198/90 "Metal-Isolator-Metal systemer"
Speciale
af: Frank Olsen
- 199/90 "SPREDT FÆGTNING" Artikelsamling
af: Jens Højgaard Jensen
- 200/90 "LINEÆR ALGEBRA OG ANALYSE"
Noter til den naturvidenskabelige basisuddannelse.
af: Mogens Niss
- 201/90 "Undersøgelse af atomare korrelationer i amorfe stoffer ved røntgendiffraktion"
af: Karen Birkelund og Klaus Dahl Jensen
Vejledere: Petr Višcor, Ole Bakander
- 202/90 "TEGN OG KVANTER"
Foredrag og artikler, 1971-90.
af: Peder Voetmann Christiansen
- 203/90 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK" 1974-1990
af: læser tekst 170/88
- 204/91 "ERKENDELSE OG KVANTEMEKANIK"
et Breddemodul Fysik Projekt
af: Thomas Jessen
Vejleder: Petr Višcor
- 205/91 "PEIRCE'S LOGIC OF VAGUENESS"
by: Claudine Engel-Tiercelin
Department of Philosophy
Université de Paris-1
(Panthéon-Sorbonne)
- 206a+b/91 "GERMANIUMBEAMANALYSE SAMT A - GE TYNDFILMS ELEKTRISKE EGENSKABER"
Eksperimentelt Fysikspeciale
af: Jeanne Linda Mortensen og Annette Post Nielsen
Vejleder: Petr Višcor
- 207/91 "SOME REMARKS ON AC CONDUCTION IN DISORDERED SOLIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 208/91 "LANGEVIN MODELS FOR SHEAR STRESS FLUCTUATIONS IN FLOWS OF VISCO-ELASTIC LIQUIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 209/91 "LORENZ GUIDE" Kompendium til den danske fysiker Ludvig Lorenz, 1829-91.
af: Helge Kragh
- 210/91 "Global Dimension, Tower of Algebras, and Jones Index of Split Separable Subalgebras with Unitality Condition."
by: Lars Kadison
- 211/91 "J SANDHEDENS TJENESTE"
- historien bag teorien for de komplekse tal.
af: Lise Arleth, Charlotte Gjerrild, Jane Hansen, Linda Kynølev, Anne Charlotte Nilsson, Karina Tulinius.
Vejledere: Jesper Larsen og Bernhelm Booss-Bavnbek
- 212/91 "Cyclic Homology of Triangular Matrix Algebras"
by: Lars Kadison
- 213/91 "Disease-induced natural selection in a diploid host"
by: Viggo Andreasen and Freddy B. Christiansen

- 214|91 "Hålløj i æteren" - om
elektromagnetisme. Oplæg
til undervisningsmateriale
i gymnasiet.
Af: Nils Kruse, Peter Gastrup,
Kristian Hoppe, Jeppe Guldager
Vejledere: Petr Viscor, Hans Hedal
- 215|91 "Physics and Technology of Metal-
Insulator-Metal thin film structures
used as planar electron emitters
by: A.Delong, M.Drsticka, K.Hladil,
V.Kolarik, F.Olsen, P.Pavelka and
Petr Viscor.
- 216|91 "Kvantemekanik på PC'eren"
af: Thomas Jessen
-
- 217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING
IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"
by: Mogens Niss
- 218/92 "A Three-Square Theorem"
by: Lars Kadison
- 219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen
Vejleder: Jesper Larsen
- 220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH
APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"
by: Thomas P. Branson, Gestur Olafsson and
Henrik Schlichtkrull
- 222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional
Groups and Algebras Related to Quantum Physics
by: Johnny T. Ottesen
- 223/92 THE FUNCTIONAL DETERMINANT
by: Thomas P. Branson.
- 224/92 UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT
LOW TEMPERATURES
by: Jeppe C. Dyre
- 225/92 "HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent
en-krystallinsk silicium
af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer,
Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild
og Thomas Hougaard
Vejleder: Petr Viscor
- 226/92 "METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL
CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY
CONVERSION"
by: Bent Sørensen