

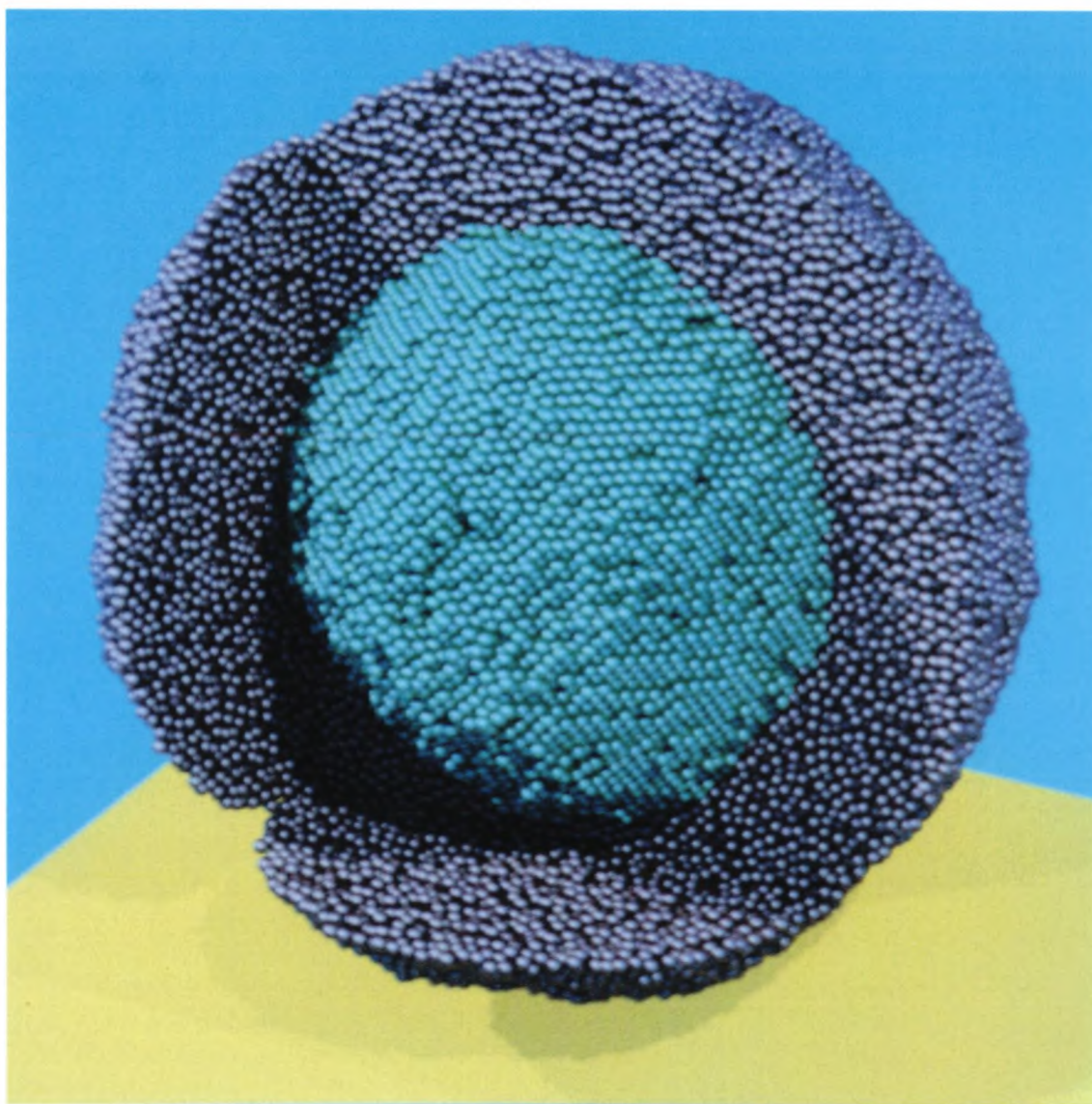
KVANT

april
1993

1

Fysisk Tidsskrift

4. årgang



TEMA: SUPERCOMPUTING • SMELTNING AF KLYNGER • VÆRKTØJ I METEOROLOGI • COMPUT-
EREN SOM LABORATORIUM • FLYDENDE KRYSTALLER • ASTROFYSIK • SORØDAGE 1993

LØSSALGSPRIS: 35 KR

KVANT

Fysisk Tidsskrift

c/o Ørsted Laboratoriet
Niels Bohr Institutet
Universitetsparken 5
DK-2100 København Ø

Telefax : 35 32 04 60
E-mail : kvant@nbivax.nbi.dk
Giro : 5 84 31 46

Udgives af

Dansk
Fysisk
Selskab

Selskabet for
Naturlærens
Udbredelse



Redaktion

Mads Hammerich (ansv.)
Rungsted Statsskole
Jørgen Friis Bak
Naturvidenskabeligt fakultet, ÅU
Jørn Christiansen
Torsten Freltoft (annoncer)
NKT Research Centre
Mogens Esrom Larsen
Matematisk Institut, KU
Finn Berg Rasmussen
Ørsted Laboratoriet, KU
Ove Østergaard
Silkeborg Amtsgymnasium

KVANT udkommer 4 gange årligt og er medlemsblad for de udgivende selskaber.
Abonnementspris: 135 kr/år (i Danmark).

Annoncepriser

1/1 side	3000 kr
1/2 side	1600 kr
1/4 side	1000 kr
Farvetillæg	1800 kr

Priserne er excl. moms og gælder for reproklart materiale. Henvendelser om annoncer til Torsten Freltoft, NKT Research Centre, telefon 43 48 35 69, telefax 43 63 00 99.

Oplag: 2000

Tryk: AKA-print

ISSN 0905-8893

Indhold:

Temanummer om supercomputing

- Ole Holm Nielsen* 1
State of the art supercomputere og computere baseret på netværk af workstation-chips er ved at møde hinanden i ydeevne.
Regnekraften som den enkelte forsker kan råde over på sit skrivebord, er den samme som en 1983 supercomputer kunne yde.

Smeltning af mesoskopiske klynger

- Karsten W. Jacobsen og Jakob Schiøtz* 3
Regnekraften er idag tilstrækkelig til at problemer omfattende klynger på adskillige tusinde atomer kan behandles i tre dimensioner.

Computeren som videnskabeligt værktøj

- Aksel Wiin Nielsen* 9
Meteorologer og klimaforskere har længe været de første til at bruge den mest avancerede regneteknik. Nu er maskinerne og metoderne slagkraftige nok til at man kan begynde at kombinere delmodeller til samlede klimamodeller.

Computeren som laboratorium

- Henrik Jeldtoft Jensen* 15
Gedankeneksperimenter på computeren kan man altid tænke sig til. Henrik Jensen strækker et net af fjederforbundne partikler ud over et potentialbakkelandskab.

Computeren som værktøj i statistisk fysik

- Ole G. Mouritsen* 19
Orden og fri energi i flydende krystaller studeres her ved hjælp af Monte Carlo metoder.

Supercomputere og astrofysik

- Åke Nordlund* 24
I moderne supercomputere kan der indrettes astrofysiske plasmalaboratorier. Her kan magnetohydrodynamiske problemer i Solens atmosfære studeres i tre dimensioner og under bekvemme forhold.

Sorøddage 1993

- Nils O. Andersen* 29
Igen i år gentages Sorøddagene for elever i gymnasiets 2.g

Meddelelser fra Dansk Fysisk selskab

. bagsiden

Forsiden:

Kobberklynge med en diameter på 15nm, under smeltning. Klyngen er simuleret med molekyledynamik. Grønne atomer er faste, røde er flydende (og delvist tørret af). Den faste kerne udviser facetter på overfladen. Se artiklen side 3.

Til Forfatterne:

KVANT modtager meget gerne artikler, forslag til emner, debatindlæg og kritik. Indlæg modtages helst i en eller anden elektronisk læsbar form. Helst på en 3.5" DOS-formatteret diskette og da helst enten som ren ASCII-fil eller i LATEX-kode. Forfattere der skriver i LATEX kan få skelettet til en artikel ved henvendelse til redaktøren. Figurer modtages i reproklar stand, enten med god kontrast på hvidt papir, eller som dias (farvebilleder).

Temanummer om supercomputing

Ole Holm Nielsen, UNI•C

Dette nummer af Kvant giver nogle danske eksempler på, hvorledes anvendelsen af moderne computere, og specielt supercomputere, kan spille afgørende roller i forskellige forskningsgrene. Artiklerne understreger en klar tendens i moderne fysik: Simuleringer af komplicerede fysiske systemer på computere ("computer eksperimenter") er i mange felter blevet et afgørende værktøj til opnåelse af ny viden. De valgte eksempler stammer fra statistisk fysik, materialefysik, astrofysik, og klimatologi, felter hvor forfatterne viser hvilken enorm indvirkning computer-simuleringer har på moderne forskning; der kunne trækkes mange andre eksempler frem fra dansk og udenlandsk forskning, men der er ingen tvivl om at naturvidenskaben, udover eksperiment og teori, herved har fået et interessant "tredie ben". Dette er således vores tema.

Computeren er værktøjet i denne forskning. Det er særdeles tydeligt, at anvendelsen af computere generelt har grebet utroligt om sig, især i de seneste 5–10 år. Dette er båret af en teknologisk udvikling som bl.a. har gjort computeren til folkeeje, men som også har forsynet os med *workstations* og *supercomputere*, samt *software* der samtidig har gjort brugen af computere uendeligt meget lettere.

Computerteknologiens indvirkning på forskning og udvikling i almindelighed er enorm. I USA har man ligefrem defineret nogle vigtige områder, hvor supercomputing planlægges at give anledning til gennembrud i forståelsen af særdeles komplicerede problemer. Disse *Grand Challenges* omfatter bl.a. magnetisk informationslagring, katalyse, protein-design, og tre-dimensionel (3D) digital anatomi. Også i Europa er der et program omkring High Performance Computing and Networking, som skal øge udbyttet af teknologien. Fysikere er traditionelt gode til at udnytte computere i deres arbejde, og vil kunne drage stor nytte af disse programmer.

Men hvad er de væsentligste tendenser i den rivende udvikling af computerteknologi, som vi bl.a. skal udnytte til ny forskning? Det dominerende faktum er den eksponentielle vækst af CPU-kraft, hukommelses-størrelse, samt disk-kapacitet, som fås for et fast beløb. Fordoblingstiden for disse størrelser er 12-24 måneder, hvis man ser tilbage på de sidste godt 5 år, og denne rate forventes ikke at aftage i overskuelig fremtid.¹ Såvel PC'ere som workstations og supercomputere "rider" på denne bølge: Eksempelvis kan man i dag anskaffe en PC med en praktisk ydeevne på 1.5 MFLOPS for ca. 20.000 kr, mens en 40 MFLOPS workstation kan fås for ca. 150.000 kr. (MFLOPS står for millioner flydende-tals operationer/sekund).

Udover at disse tal for ydeevne fordobles som anført,

¹ Man kan også foretrække andre definitioner.

er både PC'ere og workstations begyndt at kunne indeholde flere CPU-enheder, f.eks. 2 eller 4. For at anvende disse udvikles der multi-CPU operativsystemer og compilere. Det kan forventes, at en skrivebords-workstation med 1000 MFLOPS reel ydeevne vil kunne købes om en 3–4 år.

Supercomputing-begrebet kan defineres som brugen af den til enhver tid hurtigste computer-teknologi¹. Gennembruddet kom i 1976 med CRAY-1 vektorprocessoren, som gennem årene satte tusinder af forskere i stand til at udføre numeriske beregninger på en helt uhørt skala. Nu om dage er denne vektorprocessor-teknologi velkendt af brugere og leverandører, og der findes megen anvendelses-software til at udnytte den store regnekraft. Disse computere anvender som regel den mest avancerede teknologi, og opnår derfor ekstremt høje MFLOPS-tal. Udover ved den hurtige elektronik (med typisk en cyklus-tid på 2–4 nanosek.), opnås hastigheden ved to former for parallel databehandling: Samme operation (f.eks. addition) udføres på en hel vektor af tal (f.eks. 64) ad gangen i en såkaldt pipeline, og der kan være et antal CPU'er der arbejder i parallel (for tiden op til 16).

Imidlertid er vektorprocessorer i dag ikke så unikke, som de var for 10 år siden, forstået på den måde at forholdet mellem deres regnehastighed og det som den enkelte forsker kan have til rådighed ved sit skrivebord er blevet formindsket drastisk: For 10 år siden kunne en CRAY-1 måske yde op til 50 MFLOPS, mens en VAX-11/780 kunne yde 0.1 MFLOPS, en faktor 500 til forskel. I dag kan en moderne vektorprocessor yde måske 500 MFLOPS (pr. CPU) mens en workstation kan yde 50 MFLOPS, hvilket kun er en faktor 10. Desuden gør masseproduktionen, at en workstation er langt billigere pr. MFLOPS ydeevne.

Parallelle supercomputere repræsenterer en teknologi, som i disse år er i færd med at revolutionere begrebet supercomputing, og atter frembringe supercomputere som distancerer "lokale" maskiner med en stor faktor. Ved at sætte hundreder eller tusinder af CPU'er sammen, oftest baseret på kommercielle workstation chips, kan der dels opnås en tilsvarende faktor i ydeevne, og dels er pris/ydeevne forholdet for en sådan supercomputer ikke er urimeligt meget højere end for den personlige workstation. Samtlige supercomputer-leverandører satser i dag på disse parallelle maskiner, som på langt sigt vil erstatte vektorprocessorerne fuldstændigt. Leverandørernes erklærede mål er at fremstille computere med ydeevne over 1 TeraFLOPS (10^{12} operationer/sekund), hvilket antages at ville nås omkring 1995, og dermed forsyne *Grand Challenge* projekterne med den fornødne regnekraft. Den

største maskine der findes i dag kan teoretisk yde 0.128 TeraFLOPS.

Situationen i 1993 kan beskrives som en overgangsfase, hvor vektorprocessorerne i mange tilfælde stadig kan være de hurtigste. Men i "den lave ende" yder workstations jævnlgt næsten lige så stor regnehastighed, for en langt lavere pris. I "den høje ende" bliver et stigende antal anvendelser omskrevet til parallelle supercomputere, og får derved en langt større regnehastighed. Imidlertid er overgangen til parallelisme blevet beskrevet som en "reinkarnation snarere end en evolution" af de nødvendige computer-programmer. Det at udtænke parallelle algoritmer er blevet en nødvendighed, hvis man ønsker at benytte fremtidens supercomputere. Uden tvivl vil også mange grene af fysikken blive påvirket af disse nye computere, og der forestår spændende udfordringer med at udnytte mulighederne optimalt og udtænke sine egne Grand Challenges.

Referencer:

- 1) R. W. Keyes, Physics Today, August 1992, p. 42.



Ole Holm Nielsen, er Ph. D. i fysik fra Århus Universitet, har været ansat hos Xerox i USA, samt ved NORDITA, Københavns Universitet og Danmarks Tekniske Højskole. Er nu seniorkonsulent i Scientific Computing enheden ved UNI•C.

Æraen for traditionelle supercomputere er slut og en ny tid i supercomputing er lige begyndt

POWER CHALLENGE™ Supercomputer server

Challenge produktlinien er markedets mest fleksible serverløsning, der varierer lige fra enkelt-processor konfigurationer til symmetriske multi-processor løsninger med op til 36 processorer.

Power Challenge

er en Challenge variant med op til 5,4 GFLOPS supercomputer ydeevne. For yderligere informationer ring til:



Power Challenge er bygget til at klare dine største udfordringer!

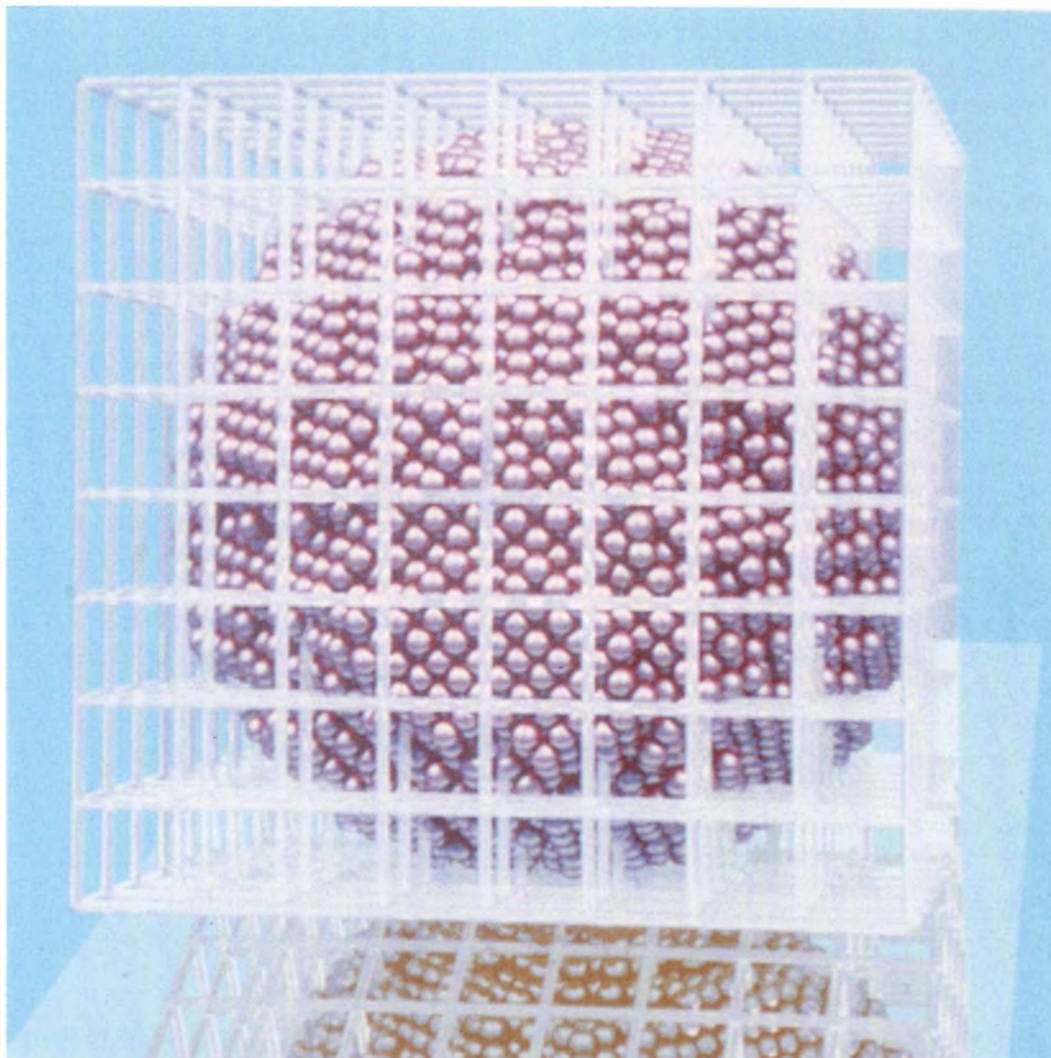
Med den nye produktlinie af supercomputere har Silicon Graphics gjort det muligt for mindre og mellemstore virksomheder at anvende supercomputere i det daglige arbejde, idet den nye RISC mikroprocessor teknologi forbedrer pris/ydelsen op til tyve gange.



**Silicon Graphics A/S, Herstedøstervej 27 - 29, 2620 Albertslund
telefon 43 43 86 00 * telefax 43 43 86 06**

Smeltning af mesoskopiske klynger

Karsten W. Jacobsen og Jakob Schiøtz (Fysisk Institut, DTH).
Ole Holm Nielsen (UNI•C).



Figur 1. En kubisk beregningsmæssig "kasse" opdelt i 8^3 ens mindre celler. I "kassen" er indlejret en kobber-klynge med 16727 atomer. I en parallel-computer med 512 processorer kan hver enkelt celledes regnearbejde udføres på netop 1 processor.

Indledning

Der har i de senere år været en stor interesse for beskrivelsen af mesoskopiske systemer, dvs. fysiske systemer, som har en størrelse mellem det atomare ("mikroskopiske") og det klassiske ("makroskopiske"). En typisk skala for et mesoskopisk system kan være af størrelsesordenen 100 Å. Interessen for de mesoskopiske systemer skyldes, at de eksemplificerer overgangen fra det atomare område, hvor kvantefænomener er dominerende, til det makroskopiske område, hvor kontinuumsbeskrivelser som termodynamik og elektromagnetisk feltteori har deres anvendelsesområde. Det er derfor muligt i mesoskopiske systemer at studere de forskellige beskriv-

elsesmåders afgrænsning: For hvor store systemer er kvantemekaniske effekter stadig dominerende; eller for hvor små systemer er en termodynamisk kontinuumsmodel tilstrækkelig?

Blandt de mesoskopiske systemer, som har været studeret intensivt gennem de seneste år, findes de atomare klynger. Som allerede tidligere beskrevet i KVANT^{1, 2}, har det været muligt at påvise eksistensen af kvantemekaniske skaleffekter i klynger bestående af alkali eller ædel metal atomer op til klyngestørrelser på adskillige tusinde atomer. Skaleffekterne viser sig som en særlig stabilitet af klynger med visse størrelser (bestående af et "magisk" antal atomer) og har sin forklaring i den elek-

troniske struktur i klyngerne: Ved de magiske størrelser er de elektroniske skaller i klyngerne netop fyldt helt op. Fænomenet er helt analogt til, hvorledes fyldningen af de elektroniske skaller i enkelte atomer leder til en særlig stabilitet af de ædle gasser i det periodiske system. Skaleffekterne har også betydning for klyngernes form. Klynger med en størrelse svarede til et magisk tal, har for eksempel en tendens til at være mere runde end ikke-magiske klynger.

For større metalklynger med 5000-20000 atomer kan en anden type af magiske tal vise sig. De elektroniske skaleffekter er for disse klynger ikke af så væsentlig betydning, men den geometriske pakning af atomerne i klyngerne kan give anledning til en særlig stabilitet af klynger med et antal atomer, som svarer til de såkaldte Mackay ikosaedre¹. Ved at vælge denne struktur opnår klyngerne en forholdsvis lav overfladeenergi, fordi alle overflader består af tætpakkede planer af atomer. De magiske tal definerer så de størrelser, hvor de tætpakkede flader netop støder pænt sammen i den ikosaedriske struktur. I dette størrelsesområde er det altså ikke direkte den elektroniske struktur, men mere den geometriske ordning af atomerne og klyngernes overfladestruktur, som er afgørende for stabiliteten.

For endnu større klynger er det klart, at det indre af klyngen efterhånden må ligne det indre af en meget stor krystal af metallet. Det vil sige, at atomernes ordning inden i klyngen må blive den samme som i store stykker af metallet. For metallet kobber, som vi især vil koncentrere os om i denne artikel, er gitterstrukturen fladecentreret kubisk, og det må altså også være strukturen inden i meget store klynger. Der er derfor endnu en kvalitativ ændring i klyngernes stabilitet som funktion af deres størrelse, når man bevæger sig fra området med de ikosaedrale magiske tal til et område, hvor det indre af krystallen må have samme gitteropbygning som en uendelig krystal. Det er sidstnævnte område, hvor systemet størrelsesmæssigt nærmer sig den termodynamiske grænse, vi vil beskæftige os med her. Vi vil diskutere klyngernes form, smeltningen af en stor klynge, samt vise et enkelt eksempel på atomernes kollektive dynamik i en klynge ved uddrivningen af en dislokation.

Molekyledynamik på en parallelcomputer

En af måderne, hvorpå man teoretisk kan behandle metalklyngers opførsel, er ved hjælp af computersimuleringer af atomernes bevægelse. For eksempel kan man ved en såkaldt molekyledynamisk simulering løse bevægelsesligningerne (Newtons 2. lov) for alle atomerne i en klynge som funktion af tiden, og på denne måde opnå meget detaljeret information om forhold i klyngen. I denne forbindelse melder der sig umiddelbart to problemer. Det ene er, at det er nødvendigt at kende vekselvirkningen mellem atomerne for at kunne beregne de kræfter, hvormed de påvirker hinanden. Dette problem vil vi ikke gå ind på her, men blot nævne, at der for nylig er udviklet modeller, som på meget effektiv vis behandler

dette problem. Det andet problem er, at hvis vi er interesseret i store metal klynger med måske hundredetusindvis af atomer, stilles der meget store krav til de computere, som kan anvendes til en sådan simulering, både hvad angår deres hastighed og størrelsen af hukommelsen.

Den nye udvikling af parallelcomputere med mange processorer, som arbejder på samme problem, har vist sig at være et kærkomment supplement til sædvanlige arbejdsstationer ved molekyledynamiske simuleringer. I visse tilfælde ville simuleringerne simpelthen ikke være mulige uden disse supercomputere.

En parallelcomputers effektivitet afhænger naturligvis af, om de mange processorers kapacitet kan udnyttes effektivt. Hovedspørgsmålet ved anvendelsen af en parallelcomputer er derfor, hvorledes data og beregningsopgaverne fordeles mest effektivt på processorerne. For molekyledynamiske simuleringer har det vist sig, at en meget simpel strategi kan anvendes med succes, og det er denne metode, som vi har anvendt ved simuleringer af kobberklynger. Simuleringerne er udført på UNI-C's Connection Machine CM-200 i Lyngby. Denne CM-200 har 256 64-bits processorer med en samlet maksimal regnekraft på 2560 MFLOPS (millioner operationer per sekund). Computeren er den hurtigste i Danmark, men den er dog allerede relativt lille set i forhold til, hvad der nu findes i udlandet. Omend maskinen kun har 256 fysiske processorer, understøtter CM-200 i hardware en emulering af et vilkårligt multiplum af 256 processorer, som f.eks. $4096 = 256 \times 16$.

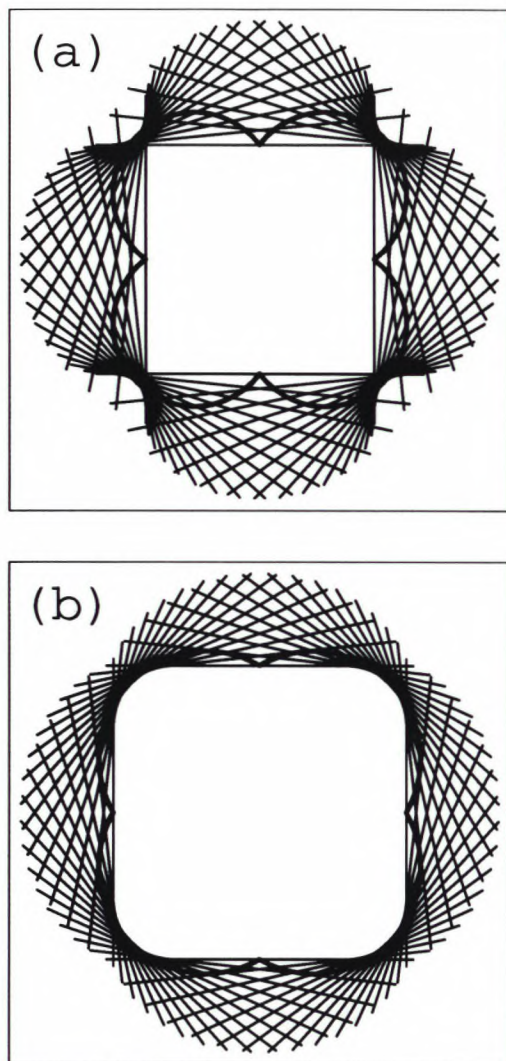
Fremgangsmåden ved organiseringen af den molekyledynamiske beregning er forsøgt visualiseret i fig.1. Processorerne (og hukommelsen) i parallelcomputeren er arrangeret i et kubisk netværk, hvor processorerne er i stand til at kommunikere meget effektivt med naboprocessorerne. Dette gitter af processorer tænkes nu lagt direkte ned over metalklyngen som vist i figuren. De enkelte processorer får så som opgave at beregne kræfterne og bevægelsen for atomerne i en lille boks omkring hver processor. På den måde bliver beregningsopgaverne fordelt mellem processorerne. Hvis et atom bevæger sig fra en boks til en anden overføres de data, som beskriver dette atom så fra hukommelsen i den første boks til hukommelsen i den anden, og ved den videre beregning er det processoren, der tilhører den nye boks, som må tage sig af beskrivelsen af dette atom.

Den gode effektivitet af denne algoritme hænger blandt andet sammen med, at vekselvirkningen mellem atomerne i klyngen har en forholdsvis kort rækkevidde. Dette er tilfældet for metalliske systemer, hvor den elektroniske skærmning er meget effektiv. Den enkelte processor behøver så kun at "tale med" de nærmeste naboprocessorer ved beregningen af kræfterne på et givet atom.

En klynges form

Hvad er ligevægtsformen af en stor klynge af atomer? Dette spørgsmål er et klassisk problem inden for termodynamikken, og blev løst i begyndelsen af dette århundrede

af Wulff. Antag, at man kender overfladens fri energi $F(\hat{n})$ for de forskellige mulige overflader på en klynge (givet ved overfladenormalen $\hat{n}$). I den termodynamiske grænse, hvor klyngen er meget stor, kan ligevægtsformen så findes ved at minimere den totale frie overfladeenergi for fastholdt volumen af klyngen.



Figur 2. Wulff konstruktionen: De fede kurver angiver overfladens fri energi som funktion af overfladens retning i et polært plot. De smallere linjer skærer de fede kurver vinkelret på radiusvektor. Klyngens ligevægtsform er givet ved det indre område afgrænset af de smalle linjer. I (a) er klyngen fuldstændigt facetteret i plane flader svarende til lave temperaturer, mens der i (b) er afrundede områder.

Løsningen til dette problem kan formuleres elegant geometrisk ved den såkaldte Wulff konstruktion, som er skitseret for et 2-dimensionalt eksempel i fig.2. Konstruktionen består i først at angive den frie overfladeenergi som funktion af retningen (overfladenormalen $\hat{n}$) i et polært plot (den fede kurve på figuren). I hvert punkt på denne kurve afsættes nu en ret linje, som står vinkelret på radialretningen fra centrum til punktet (de tyndere linjer på figuren). Ligevægtsklyngens form er så givet

ved det indre område, som afgrænses af alle de rette linjer. Som det fremgår af figuren kan formen bestå af en række rette linjer, som svarer til retninger med specielt lave overfladeenergier. Visse områder kan dog også være afrundede, som vist i fig.2b. I en 3-dimensionel konstruktion bliver linjestykkerne erstattet af plane områder, og man siger, at klyngen har bestemte *facetter* med lav overfladeenergi. Hvis klyngen er ved tilstrækkeligt lave temperaturer, bliver facetteringen fuldstændig, så klyngens ydre består af et endeligt antal plane flader. For mindre klynger udgør kanter og hjørner en stor del af overfladen, og deres bidrag til energien kan ikke negligeres. Billedet bliver derfor mere kompliceret. Facetteringen af for eksempel klynger af guld er blevet observeret eksperimentelt ved hjælp af elektronmikroskopi³, og som det kan skimtes på fig.1, er det også muligt ved en simulering at konstatere facettering af en klynge.

Facetteringen af små metalklynger har teknologisk interesse inden for for eksempel heterogen katalyse, hvor den aktive del af en katalysator netop kan bestå af små metalpartikler. De kemiske processers hastighed kan afhænge af hvilke facetter, de foregår på, og det er derfor af interesse at have kendskab til partiklernes form.

Smeltning af en kobber-klynge

Hvis en klynge varmes op over smeltepunktet forsvinder gitterstrukturen i klyngen, og der er derfor ikke længere forskel på overfladerne i de forskellige retninger. Den frie overfladeenergi afhænger således ikke af retningen, og klyngen bliver kuglerund. Det følger således, at der må være en form for overgang fra et lavtemperaturområde med en fuldstændig facettering af en klynge til et højtemperaturområde, hvor klyngen er helt rund. Hvordan ser denne overgang ud? Er det en pludselig ændring, hvor facetteringen forsvinder, samtidig med at klyngen smelter, eller er der tale om en gradvis ændring, hvor dele af klyngen smelter og samtidigt ændrer form? Nogle af disse spørgsmål har det været muligt at behandle ved hjælp af molekyledynamiske simuleringer⁴.

I sædvanlig makroskopisk termodynamik, hvor man ser bort fra overfladeeffekter, er beskrivelsen af smeltningen af et fast stof til en væske velkendt. Stoffet tilføres energi i form af varme, og når smelte-temperaturen T_c nås, smelter stoffet ved konstant temperatur indtil man har tilført smeltevarmen, hvorefter temperaturen igen stiger i væsken. I de senere år har der været stor interesse for at beskrive overfladers indflydelse på smelteprocessen, i særdeleshed det såkaldte *pre-melting* ("for-smeltning") fænomen, der tidligere har været omtalt i KVANT⁵. På visse metaloverflader begynder smelteprocessen flere hundrede grader under den egentlige smeltetemperatur med, at et ganske tyndt overfladelag af krystallen smelter. Ved opvarmning af metallet bliver det smeltede lag så tykkere og tykkere, indtil det ved smeltetemperaturen breder sig hele vejen gennem krystallen. For-smeltningen er stærkt anisotrop. På en kobberkrystal for-smelter de tætpakkede overflader slet ikke, mens de mere åbne over-

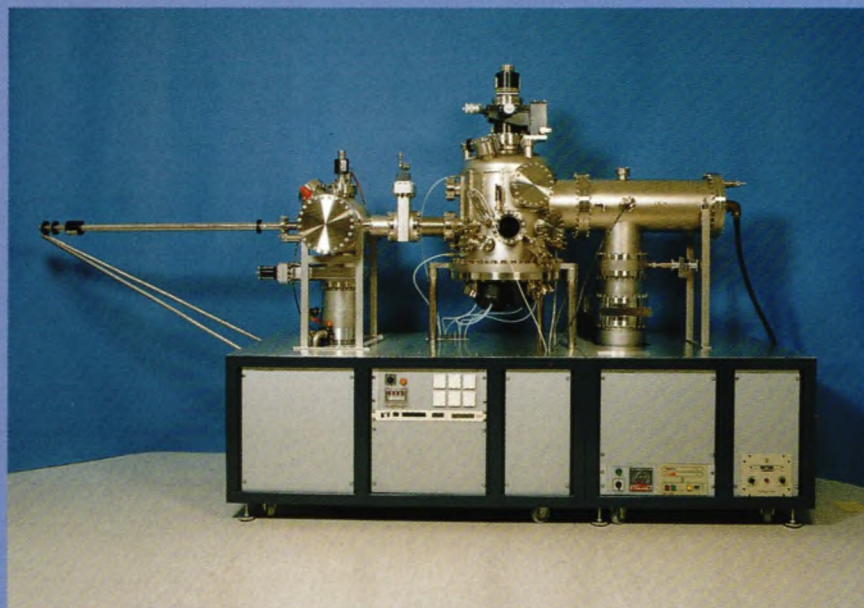
MTD-450 UHV

Deponeringssystem fra DCA Instruments

MTD-450 UHV deponerings-system til dyrkning af et bredt sortiment af materialer og tyndfilm strukturer i et MBE dyrkningsmiljø af høj kvalitet.



MTD-450 med to magnetronkilder og fire effusions celler.



Ultra høj vacuum teknologi til forskning og industri.

- Magnetron katodeforstøvning
- Termisk fordampning
- E-stråle fordampning
- Ion-båret deponering
- Laser forstøvning

Hver kilde er forsynet med en hurtigt reagerende shutter, som resulterer i en præcis fremstilling af komplekse tyndfilm strukturer.



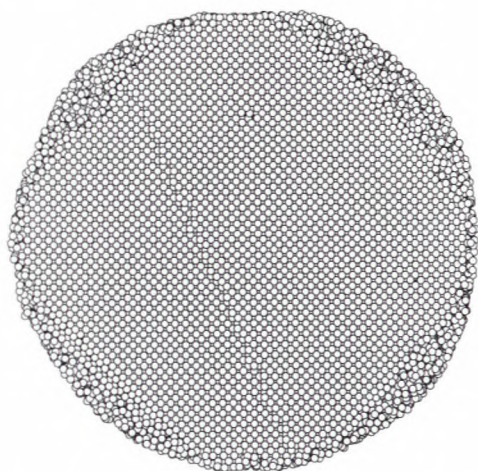
AAGE CHRISTENSEN A/S
Skelmosevej 10
Box 399, 2500 Valby
Tlf.: 36 44 24 44
Fax: 36 44 20 24

Forhandler af:

Kryostater, alle typer af lavtemperatur måle- & kontroludstyr, elektromagneter, Gaussmetre, kryopumper, turbopumper, ionpumper, diffusionspumper, gate-ventiler, forpumper, effusionsceller, manipulatorer UHV & HV-fittings, elektriske gennemføringer læksøgere.

flader udviser for-smeltning.

Der er derfor mulighed for, at der i en klynge kan optræde et interessant samspil mellem formen af klyngen og for-smeltningen af visse facetter. Dette er virkelig tilfældet for en kobberklynge, som det kan ses på fig.3. Figuren viser et tværsnit af en kobberklynge med 178219 atomer. Atomernes bevægelse i den molekyledynamiske simulation er blevet midlet over et lille tidsrum, så atomernes vibrationer er midlet ud. Det fremgår klart af figuren, at klyngen antager en fast form med en krystalstruktur i sit indre. Den krystallinske opbygning fortsætter i visse retninger helt ud til overfladen af klyngen, hvor den afsluttes med en plan facet. I andre retninger er gitterstrukturen dog ødelagt tæt ved overfladen, og der optræder såkaldte *flydende linser*, hvis overflader er afrundede, som på en fuldstændig smeltet klynge. Flydende linser er også observeret ved hjælp af elektronmikroskopi; men det er meget vanskeligt eksperimentelt at opnå detaljeret information om linsernes struktur.



Figur 3. Tværsnit af en simuleret kobber klynge bestående af 178219 atomer. Klyngen er tydeligvis krystallinsk indeni og gitterstrukturen fortsætter i visse retninger helt ud til overfladen. For andre overfladeorienteringer ses fremkomsten af "flydende linser". Linjen ned midt igennem krystallen er et enkelt atomart step, som er fremkommet fordi krystallen ikke er gennemskåret perfekt langs et gitterplan.

Hvis den i figuren viste klynge tilføres mere energi, gror de flydende linser og smelter sammen til en flydende skal omkring klyngens faste kerne (se forsidebilledet på dette nummer af KVANT). Formen af den faste kerne er ikke fuldstændig rund, og dens anisotropi kan ved en omvendt Wulff konstruktion give information om anisotropien i den frie energi for grænsefladen mellem den faste kerne og det flydende kobber.

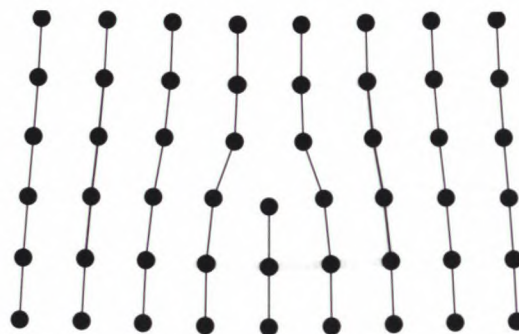
I et vist energi- og temperaturområde under smeltningen opfører klyngen sig på en måde, som umiddelbart virker forbløffende. Hvis klyngen tilføres mere energi, *falder* temperaturen. Dette skyldes, at den tilførte energi medfører, at en større del af klyngen smelter, hvorved grænsefladen mellem den faste og flydende del af klyngen bliver mindre. Dette virker tilbage på temperaturforholdene i klyngen på en sådan måde, at tempera-

turen falder. Det bør bemærkes, at dette fænomen dog kun optræder, fordi klyngen er fuldstændig isoleret. Hvis klyngen bringes i kontakt med et varmebad, vil energiudveksling med varmebadet få klyngen til at smelte helt.

Dislokationer i en kobber-klynge

Som et sidste eksempel på den type information, man kan få fra molekyledynamiske simuleringer, vil vi beskrive en dislokations bevægelse i en kobberklynge.

Under nedkølingen af en 16727 atomer stor kobberklynge, som var på grænsen til at størkne fuldstændigt, gjordes en overraskende observation: en "linse" af størknet kobber med flere hundrede atomer på klyngens overflade flyttede sig pludselig en halv gitterposition, og krystalstrukturen i klyngen var herefter i bedre overensstemmelse med kobbers ligevægts-gitterstruktur. En nærmere analyse viste, at der var tale om en partiel dislokation, der var opstået under afkølingen af væskelagene over den faste kerne.



Figur 4. En kant-dislokation. Den grå bane ville være et lukket kredsløb i en perfekt krystal.

En dislokation er en liniedefekt, som lettest kan illustreres ved at tage et perfekt krystalgitter og fjerne et halvt gitterplan. Derved opstår en liniedefekt langs kanten af gitterplanet, mens resten af krystallen stadig er perfekt. En dislokation viser sig blandt andet ved, at hvis man bevæger sig rundt om den langs en kurve, der ville være lukket i en perfekt krystal, lukker kurven ikke, hvis den omslutter dislokationslinjen (se fig.4.).

Krystaller med en mere kompliceret struktur end simpel kubisk kan betragtes som sammensat af sekvenser af planer af forskellig type. En dislokation dannes da ved at fjerne en række af sådanne halvplaner (ellers er krystallen ikke fejlfri langt fra dislokationen), og det vil da være energetisk favorabelt for dislokationen at dele op i såkaldte partielle dislokationer, der hver svarer til fjernelsen af et enkelt halvplan. Imellem to sådanne partielle dislokationer vil der da være en todimensionel krystalfejl, en såkaldt stabelfejl.

I den simulerede klynge optræder en sådan partiel dislokation. Den sad oprindeligt fast i en anden krystalfejl, men slider sig så løs, og bevæger sig med høj hastighed gennem krystalgitteret. Under sin bevægelse fjerner den en stabel-fejl, og drives frem af den energi, der

herved frigøres. Når dislokationen nærmer sig overfladen, tiltrækkes den heraf og forlader klyngen (se fig. 5.). Undervejs ser man kraftige termiske fluktuationer i dislokationens bevægelse.



Figur 5. En dislokation i en kobber-klynge. Dislokationslinjen er grå. De grå områder ved overfladen skyldes, at den uordnede struktur i de øverste lag forvirrer den algoritme, der finder dislokationen. I området over dislokationen er en stabelfejl (kan ikke ses på denne figur). Stabelfejlen fjernes, når dislokationen bevæger sig ud af klyngen. Sekvensen tager cirka 13 picosekunder.

Når det er interessant at studere dislokationers bevægelse og vekselvirkninger, skyldes det, at de er helt afgørende for metalleres mekaniske egenskaber (styrkeegenskaber, brudstyrker, metaltræthed m.m.). For at

kunne simulere dislokationers dynamik i konkrete materialer er det nødvendigt at simulere meget store systemer, og det er derfor nødvendigt med stor regnekraft.

Konklusion

Ovennævnte eksempler viser, hvorledes det er muligt at hente detaljeret information om for mesoskopiske systemers opførsel ved hjælp af molekyledynamiske simuleringer. Simuleringerne stiller store krav til den beregningsmæssige hastighed og computerhukommelsen. For denne type af forskning er det derfor af yderste vigtighed at have adgang til meget kraftige arbejdsstationer såvel som supercomputere.

Referencer:

- 1) S. Bjørnholm, KVANT **1**, nr. 1 (1990).
- 2) K. Hansen, KVANT **2**, nr. 3 (1991).
- 3) S. Iijima og T. Ichihashi, Physical Review Letter, **56**, 616 (1986).
- 4) Ole H. Nielsen, James P. Sethna, Per Stoltze, Karsten W. Jacobsen og Jens K. Nørskov, *Melting a copper cluster: Critical droplet theory*, preprint..
- 5) P. Stoltze, KVANT **2**, nr. 1 (1991).



Karsten Wedel Jacobsen, er uddannet i fysik ved Århus og Københavns Universitet. Lavede sin Ph. D. afhandling ved NORDITA og var bagefter postdoc ved Cornell University, USA. Er nu lektor på Fysisk Institut, Danmarks Tekniske Højskole.



Jakob Schiøtz, er civilingeniør fra elektroteknikken. Er nu Ph. D. studerende ved Fysisk Institut, Danmarks Tekniske Højskole.

Computeren som videnskabeligt værktøj.

Aksel Wiin Nielsen, Niels Bohr Institutet for Astronomi, Fysik og Geofysik.

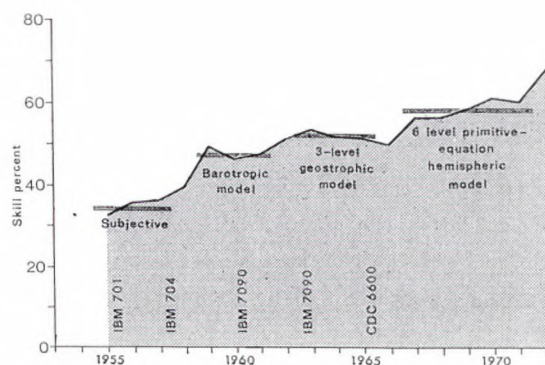
Indledning

I de sidste fire decennier har vi oplevet en infiltration af computeren i næsten alle dele af samfundet. I denne artikel skal vi fortrinsvis holde os til brugen af computeren i videnskaben og forskningen, hvor den anvendes på flere forskellige måder. I grove træk kan man dele brugen i tre væsentligt forskellige områder. Den anvendes for det første til bearbejdning af data, hvor man foretager statistiske og andre former for analyser af store mængder af data, der kan have deres oprindelse fra mange forskellige kilder. Formålet er at beskrive et system fra forskellige synsvinkler. Denne anvendelse er ikke altid lige ud af landevejen, men må dog anses for ret elementær sammenlignet med andre anvendelser. Det næste område kan vi kalde simulationsområdet eller det diagnostiske område. Hermed mener vi, at vi ved hjælp af en model, som vi selv har skruet sammen, forsøger at efterligne et system, som allerede kan beskrives ved en given datamængde. Modellen kan bygge på grundlæggende videnskabelige love, men den kan også være rent empirisk eller en blanding af teori og empirisme. Den tredje gruppe af problemer er forudsigelser, hvor man forsøger at beregne fremtidige tilstande af et givet system. Denne prognostiske virksomhed er ofte den virkelige afprøvning af, om vi forstår et givet system, for kun vel forståede systemer kan vi gøre os et berettiget håb om at forudsige.

Den ovenstående opdeling af problemerne ligner naturligvis de idéer, som vi har om videnskabens udvikling, hvor man sædvanligvis taler om fire trin: observationsfasen, beskrivelsesfasen, forudsigelsesfasen og kontrolfasen. Man antager, at enhver velfunderet videnskabsgren har gennemløbet disse faser i kronologisk orden, men det bør påpeges, at medens man ikke kan komme til en ny fase uden at have været igennem de foregående, så vil ankomsten af en ny fase ikke betyde, at arbejdet i de tidligere faser ophører. Der vil stadig være behov for observationer og deres bearbejdning, selv om man er begyndt på forudsigelsesfasen. Ikke alle videnskabsgrene kommer i århundredernes løb gennem alle fire faser. Medens de to første næsten altid eksisterer, er det ofte svært at komme ind i forudsigelsesfasen, fordi den kræver en formulering af en prognostisk model, der kan være svær at formulere på visse områder. Kontrolfasen nås kun sjældent i naturlige systemer, fordi vi ikke har de nødvendige energiresourcer til at påvirke meget store systemer, men der er dog undtagelser. F.eks. er vi i stand til at kontrollere en kunstig satellit, når en tilstrækkelig energimængde er opbevaret i den.

I det følgende vil det være naturligt for mig at vælge mine eksempler fra mit eget fagområde (at-

mosfærefysikken), men forhåbentlig vil mine betragtninger alligevel have en vis generel betydning. Meteorologien har iøvrigt været en stor bruger af computeren siden dens opfindelse i slutningen af 1940'erne. De første spæde forsøg på at fremstille vejrprognoser startede i 1949 ved The Institute for Advanced Studies i Princeton, New Jersey. Siden da har de meteorologer, der beskæftiger sig med vejrprognoser og klimamodeller, altid anvendt de mest avancerede computere. Vi har gang på gang været nødt til at tilpasse os til nye systemer som f.eks. parallelle computere, fordi appetitten på stadig flere enkeltheder har været umættelig. Dette gælder både de fysiske processer og ønsket om en beskrivelse af stadig mindre systemer i atmosfæren. Fig.1 viser et mål for godheden af de første operationelle forudsigelser for kun 36 timer.



Figur 1. Udviklingen af godheden af numeriske forudsigelser i 1955-72. De anvendte computere er angivet på tidsaksen.

Observationer og beskrivelse

For at beskrive et givet system må man have målinger af de relevante parametre. Ved hjælp af disse observationer forsøger man at beskrive systemets tilstand til et givet tidspunkt, og hvis datamængden tillader det, ønsker man også at kunne beskrive systemets udvikling gennem en længere tid. På grundlag af sådanne analyser kan man komme frem til en beskrivelse af typiske tilstande af hele systemet. Lykkes dette, kan man ofte ved yderligere beregninger få en vis indsigt i systemets opførsel uden nødvendigvis at komme ind i forudsigelsesfasen.

Lad mig give et meteorologisk eksempel. Da observationerne i midten af dette århundrede var blevet så fuldstændige, at man kunne fremstille globale eller i det mindste hemisfæriske analyser af atmosfærens tilstand på daglig basis, fik man en mulighed for at give svar på visse spørgsmål, der havde plaget meteorologien siden det 17.

århundrede. Det havde været kendt, at atmosfæren opvarmes mere ved Ækvator end ved polerne. Da det ikke bliver mere og mere varmt på de lave bredder og koldere og koldere ved polerne, må der være en systematisk varme-transport fra Ækvator mod polerne i de to halvkugler. Hvorledes foregår denne varmetransport? I den spekulative periode havde man postuleret et antal meridionale celler, der skulle beskrive den typiske bevægelse mellem de lave og høje bredder (Hadley og Ferrel celler), men det var først, da computeren tillod en hurtig behandling af de store datamængder på daglig basis, at man kunne påvise ved en direkte beregning af varmetransporten, at denne blev udført af de atmosfæriske bølger og næsten ikke af de tidligere postulerede celler.

I løbet af de 20 år mellem 1950 og 1970 var mange meteorologer, inklusive forfatteren, beskæftiget med at kortlægge en masse fysisk vigtige størrelser, som tilsammen kunne beskrive transporter i atmosfæren og give en beskrivelse af atmosfærens energiindhold og de energitransformationer, der foregår i den globale atmosfære. Denne virksomhed var kun mulig, fordi de systematiske observationer muliggjorde globale analyser, som derefter let lod sig arrangere til globale beregninger. At have udført disse diagnostiske beregninger uden computeren, ville ikke have været muligt, da man ønskede sådanne beregninger over dage, uger, måneder og år.

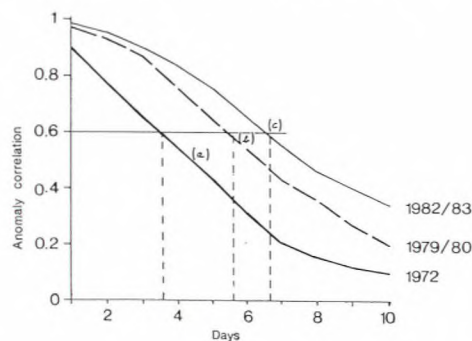
Mange videnskabsgrene er gået igennem en tilsvarende udvikling, som har tilladt en meget mere nøjagtigt og fysisk rigtigere beskrivelse. Beskrivelsesaktiviteten holder aldrig op, fordi man bruger den til at overvåge tingenes tilstand og til at registrere de ændringer, der forekommer. Vor tids miljøovervågning er bygget på lignende principper.

Forudsigelser

De fysikere, som beskæftiger sig med den klassiske mekanik og termodynamik, har længe været klar over, at de grundlæggende love for denne del af fysikken er deterministiske. Fra en given begyndelsestilstand kan der ved numerisk integration fremstilles én og kun én forudsigelse (prognose), når man har bestemt sig til den numeriske procedure, som skal anvendes ved tidsintegrationen. Man har også længe været klar over, at det var væsentligt at beskrive begyndelsestilstanden så nøjagtigt som muligt på grundlag af de eksisterende observationer. Det er for globale systemer en umulighed. Vi har kun et begrænset antal observationer til et givet tidspunkt. Målingerne kan være adskilt af flere hundrede kilometer, ja, endog tusinder af kilometer, når vi taler om den del af kloden, der er dækket af hav. Selv om de sædvanlige overfladeobservationer i de sidste halvtreds år er suppleret med radiosondeobservationer, der går op til ca. 40 km højde, og selv om satellitterne har hjulpet betydeligt gennem deres indirekte observationer af atmosfæren, så er det ikke desto mindre sandt, at en beskrivelse af temperatur, tryk og vindforhold over det globale område er behæftet med usikkerhed. Den egentlige årsag er naturligvis, at vi ikke kan observere på

den lille horisontale skala, der ligger mellem observationerne. Situationen bliver meget værre, hvis vi ville tænke os at give en tre-dimensional beskrivelse af oceanernes tilstand. Det er så svært på grund af de ganske få samtidige observationer, at det ikke har været prøvet.

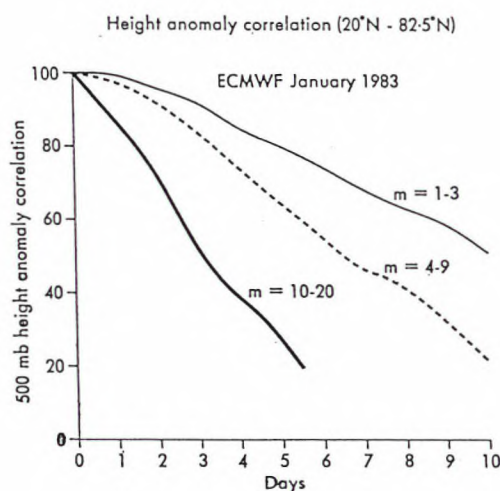
Det er ikke bare de globale systemer, der lider af denne skavank. Det er lige så umuligt at beskrive strømmingen i alle enkeltheder i et dansk vandløb, hvor strømmingen også foregår på mange skalaer fra den største, der bestemmes af vandløbets længde og bredde, til den mindste, der bestemmes af de ganske små hvirvler i åen. Endelig bør man gøre opmærksom på, at mange strømninger i naturlige systemer er af en turbulent karakter, og vi har ikke en grundlæggende teori for turbulens, selv om man har arbejdet på problemet siden begyndelsen af århundredet. Den grundlæggende opfattelse i de første 2/3 af århundredet har ikke desto mindre været, at jo bedre man kunne beskrive begyndelsestilstanden, jo længere ud i fremtiden kunne prognoserne fremstilles, og eventuelt ville der ikke være nogen principiel grænse for deres længde.



Figur 2. Kurverne viser den praktiske forudsigelighed på tre forskellige tidspunkter. Målet for godheden er korrelationen mellem forudsagte og indtrufne ændringer. Erfaringen viser, at når dette mål er mindre end 0.6, har prognosen ingen praktisk værdi.

Denne opfattelse var kædet sammen med den lignende iagttagelse, at jo bedre man ved hjælp af sin model kunne beskrive de fysiske processer i det system, som man arbejder med, desto længere kunne prognoselængden blive. Lad os igen bruge atmosfæren som eksempel. Man får ofte den opfattelse, at en model af atmosfæren følger direkte af de grundlæggende ligninger. Det gør den også, hvis man begrænser sig til det adiabatiske (d.v.s. ingen varmetilførsel) og gnidningsfri tilfælde. Men dette tilfælde er totalt urealistisk over længere tidsrum end nogle få timer. Man må derfor forsøge at beskrive varmekilderne og gnidningen. Med hensyn til den sidste har vi kun empiriske love at falde tilbage på, fordi den manglende turbulente teori igen sætter alvorlige begrænsninger. Om varmekilderne kan man sige, at de alle har det tilfælles, at selve processen foregår på en molekylær skala, medens vi skal forsøge at beskrive, hvad der foregår ved at bruge observationer, der er langt fra hinanden, eller punkter i et netværk, hvor afstanden fra punkt til punkt er i det mindste nogle dekalimeter, fordi selv de fineste modeller har gridafstande på 20-30 kilometer. Selve denne procedure,

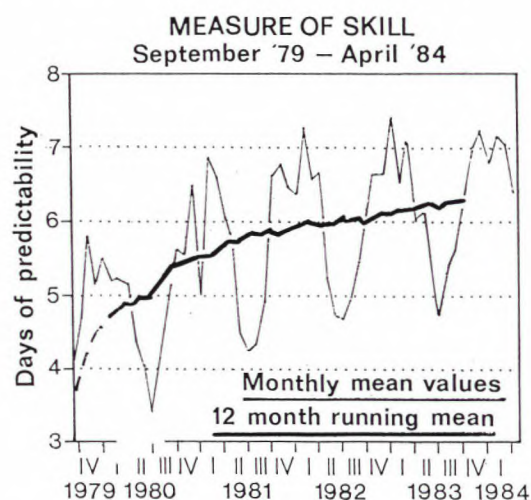
hvor man skal beskrive nettoresultatet af de molekylære processer ved hjælp af størrelser på meget større skalaer, kaldes en parameteriseringsopskrift. Det kan somme tider gøres med gode resultater, men eksakt bliver det aldrig. F.eks. har man studeret overførslen af varme og moment fra atmosfæren til havet eller omvendt, og man har ganske gode og efterprøvede opskrifter, der kan beskrive disse processer. Det sværeste er nok at beskrive vandets rolle i atmosfæren, for ikke alene kan det være til stede i tre tilstande (luft, vand og is), men det indvirker også på mange processer som strålingen fra solen, varmestrålingen fra jorden, kondensation og fordampning, nedbørsprocessen og fordampningen fra jorden.



Figur 3. Stigningen i forudsigelighed for den globale atmosfære, målt i dage, i perioden 1979-84. Bemærk, at atmosfæren er lettere at forudsige om vinteren end om sommeren.

Det turde være klart fra denne overfladiske beskrivelse, at modellen ikke heller kan være korrekt og er behæftet med usikkerhed. Ikke desto mindre var grundtanken altid den, at opskrifterne kunne gøres mere realistiske, og så kunne man fremstille prognoser over længere tidsrum, og igen så man ikke nogen principiel grænse, for ligningerne var jo deterministiske! Det store chok kom i 1963, da amerikaneren Edward N. Lorenz påviste, at selv om ligningerne er deterministiske, så er de meget følsomme overfor en ganske lille ændring i begyndelsestilstanden. Systemer, der har denne egenskab, kaldes desværre kaotiske, men det er et dårligt valgt ord - i hvert fald på dansk. Det følger umiddelbart, at sådanne systemer har begrænset forudsigelighed. Lorenz' opdagelse blev gjort med et lille legetøjssystem, der var reduceret til tre ikke lineære ligninger. Med mange flere variable skulle systemet beskrive fysik og bevægelse i en cumulus sky. Det første spørgsmål var, om den begrænsede forudsigelighed i hans system, var speciel for systemet eller mere generel. Hans kollega, Jule G. Charney, sammenkaldte med det samme en gruppe meteorologer, der var i besiddelse af globale modeller, for at undersøge om den begrænsede forudsigelighed også var en egenskab ved modeller med

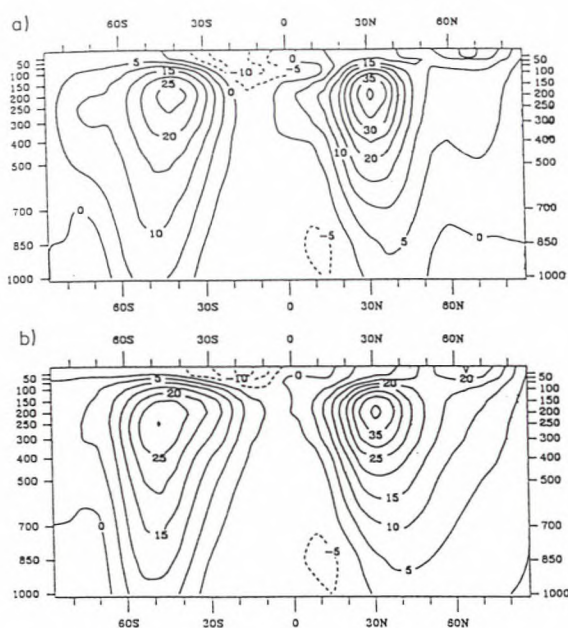
tusinder af frihedsgrader og ikke bare tre. Svaret på spørgsmålet var bekræftende, og man fandt, at den teoretiske grænse for forudsigelighed i atmosfæren var tre til fire uger beroende på årstiden. Man fandt dette resultat ved meget store beregninger, hvor man først integrerede de globale ligninger i flere uger for at få en tidsserie, med hvilken man kunne sammenligne. Dernæst gik man tilbage til begyndelsestilstanden, ændrede den lidt og gentog tidsintegrationen. Man sagde så, at al forudsigelighed var tabt, når forskellen mellem to tilstande var blevet så stor, som forskellen mellem to tilfældigt valgte tilstande fra samme årstid.



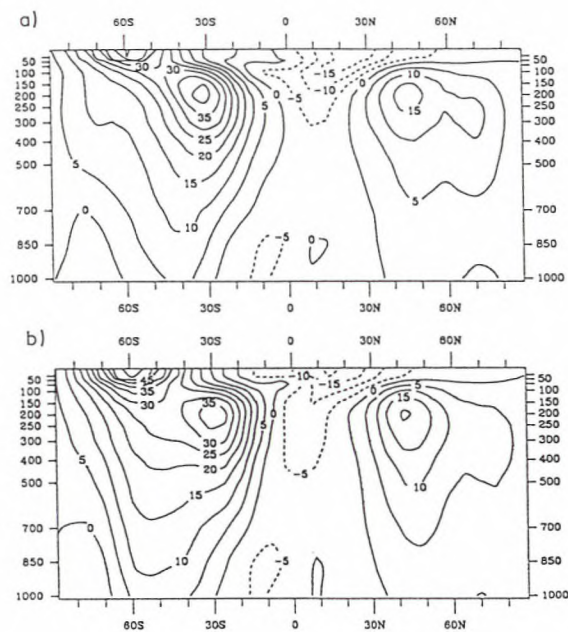
Figur 4. Korrelationen som funktion af tiden for tre forskellige bølgegrupper. De meget lange bølger ($m = 1$ til $m=3$) har størst forudsigelighed. Jo kortere bølgelængde des mindre er forudsigeligheden.

Man kan sige, at denne bestemmelse af den begrænsede forudsigelighed kun var mulig, fordi computeren tillod at gennemføre et så omfattende eksperiment. Vi har derfor i det mindste ét meteorologisk eksempel på virkeligt grundlæggende ændringer i vores fundamentale opfattelse forårsaget af computer-fysik. Hvordan forholder den praktiske grænse for forudsigelighed sig nu til den teoretiske grænse? For ca. 20 år siden bestemte Kiku Miyakoda den praktiske grænse til 3-4 dage (Se Fig.2). Den store forskel på den praktiske grænse og den teoretiske viste, at selv om man nu kendte en øvre grænse (eller i hvert fald dens størrelsesorden), så var der en så tilpas stor forskel mellem de to, at det fortsat var værd at forsøge at gøre denne forskel mindre. På dette grundlag skabtes det 'Europæiske Center for Mellem-Lange Vejr Prognoser', som forfatteren var direktør for fra begyndelsen til det tidspunkt, hvor de praktiske prognoser kunne sendes til de 16 europæiske stater, som havde skabt Centret. På det tidspunkt (1979) var den praktiske grænse øget til ca. 6 dage, og siden den tid er der lagt endnu et par dage til. Fig.3 og Fig.4 viser forskellige aspekter af disse prognoser.

De ovenstående forudsigelseseksperimenter er en si-



Figur 5. Den øvre figur er simuleringen af det zonale vindfelt for vinteren, medens den nedre figur er den observerede tilstand af samme parameter.

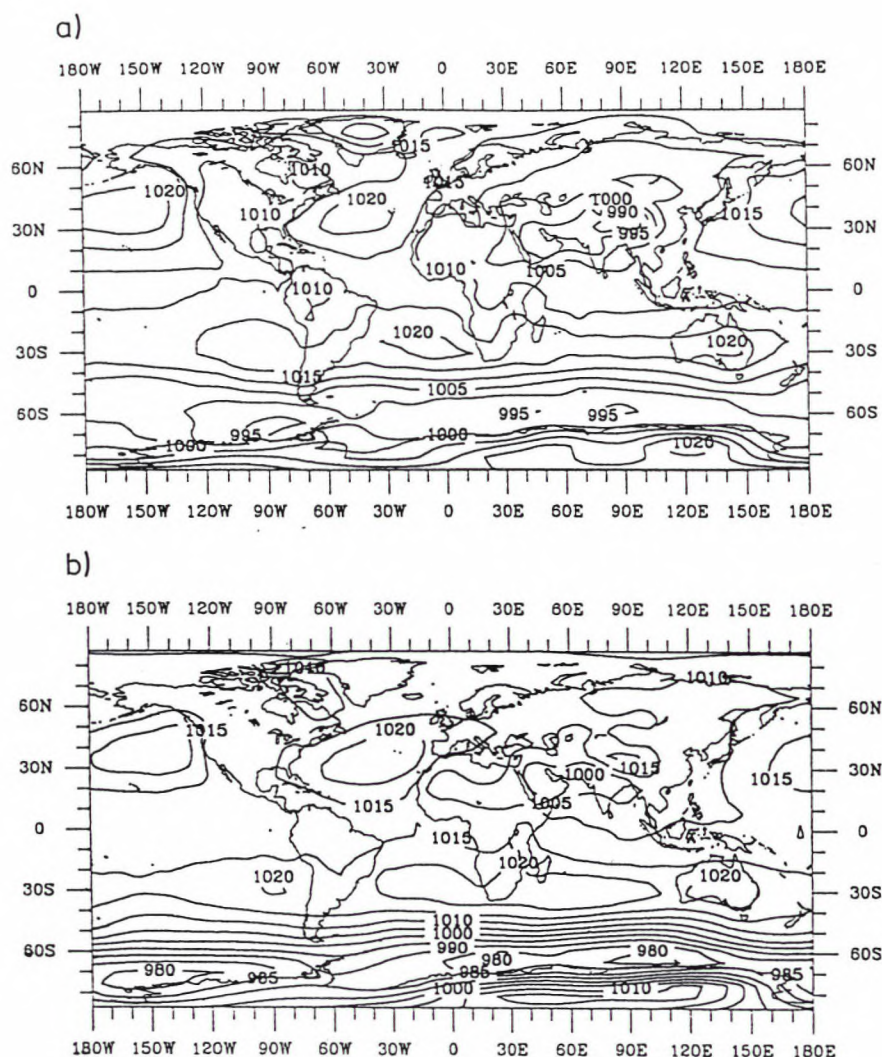


Figur 6. Som fig.5, men for sommeren.

mulation af atmosfæren på kort tidsskala. Lad os nu se på et simulationseksperiment på en meget større tidsskala, nemlig jordens klima. Dette er som bekendt defineret som atmosfærens gennemsnitlige tilstand, når man tager et gennemsnit i tiden over mange år. Normalt tages gennemsnittet over 30 år, men det er et ret tilfældigt tal. Det kunne lige så godt være 10 år. Det væsentlige er, at tidsintervallet skal være så langt, at man ikke ser forskellen mellem to på hinanden følgende år, men samtidigt så kort, at man kan observere ændringer i jordens klima. Kan man bestemme klimaet ved en modelberegning? Hvis det skal være muligt, så må man for det første tage hensyn ikke bare til atmosfæren, selv om det er dens gennemsnitlige tilstand, vi søger, men også til de andre systemer, som atmosfæren er påvirket af, og som den selv påvirker. Klimasystemet defineres på denne måde som bestående af atmosfæren, havene, kontinenterne, ismasserne og biomassen. For det andet må tidsintegrationerne arrangeres på en sådan måde, at man starter fra en atmosfære uden bevægelse, hvorefter man "tænder" for solen, som er den primære energikilde. Derved opstår der temperaturforskelle i atmosfæren, som i sin tur vil skabe bevægelse. Målet er nu at fortsætte denne tidsintegration så længe, at man kan tage det nødvendige tidsgennemsnit og undersøge, om man har reproduceret jordens klima. Fig.5 og Fig.6 giver en klar indikation af den næsten rigtige efterligning af de zonale vindfelter for vinter og sommer, medens Fig.7 viser nøjagtigheden af simulationen af trykfeltet ved jordens overflade. Det bemærkes, at disse resultater er opnået med en koblet model ved Max-

Planck-Institutet for Meteorologi i Hamburg.

I visse sektorer blandt klimatologer ser man ikke med sympati på sådanne massive beregninger. Formålet med dem fejles af bordet med en bemærkning om, at det eneste, som man ved efter en god beregning er, at ligningerne er "rigtige". Dette synspunkt deles ikke af forfatteren, fordi også klimamodellerne må indeholde en række parameteriseringsopskrifter, som er empiriske. Prøven bliver da, om vi har så stor indsigt i atmosfærens fysik og kan beskrive den på en sådan måde, at vi får en god simulation af atmosfærens tilstand og dens strømning. Forsøg i denne retning gennem de sidste 30 år har da også vist, at vi kun gradvis er kommet nærmere til målet, og at udvekslingen mellem atmosfæren og de andre dele af klimasystemet er en væsentlig del, hvis vi skal komme nær på det nuværende klima. Medens udvekslingen mellem atmosfæren og kontinenterne og ismasserne er relativt let at tage vare på, viser det sig, at udvekslingen med havene er langt det sværeste problem. Det ligger i, at begge medier bevæger sig hurtigt sammenlignet med kontinenterne og ismasserne. På den anden side bevæger atmosfæren og havet sig med meget forskellige hastigheder. Medens hastigheden i de store havstrømme er nogle cm per sekund, så er den typiske vindhastighed i den frie atmosfære snarere 10 til 50 m per sekund. Der er således et forhold på ca. 1000 mellem de typiske hastigheder. Det samme forhold eksisterer mellem massefylden i de to medier. Det er derfor et formidabelt problem at simulere koblingen imellem dem, hvor vindene i den nedre del af atmosfæren



Figur 7. Den øvre figur er den simulerede trykfordeling ved jordens overflade. Den nedre figur er den observerede fordeling af den samme parameter.

driver de store strømsystemer i havet, medens udvekslingen af varme og moment og fordampningen fra havene har en væsentlig påvirkning af atmosfæren. Koblingen mellem atmosfære- og havmodellerne er endnu ikke udført med tilstrækkelig nøjagtighed, men der arbejdes intenst på problemet ved nogle få store centre for klimaforskning i Europa og U.S.A. Selv om koblingen, som svarer til at konstruere en kobling med et udvekslingsforhold på 1000, endnu ikke har fundet en god løsning, så er der intet i vejen for at udføre disse massive beregninger, og den efterfølgende sammenligning med det virkelige klima viser ganske god overensstemmelse mellem det beregnede og observerede klima.

Alle disse meget store modeller for forudsigelse og klimasimulering er så indviklede, at de bør efterprøves ved en lang række såkaldte følsomhedsberegninger. Derved forstås en sammenligning mellem den mest fuldstændige model, som man er i besiddelse af, og det resultat, som

man kommer til, hvis man ændrer væsentligt på en af delprocesserne. På denne måde har man fundet ud af den effekt, som en enkelt delproces har på slutresultatet. I en forudsigelsesmodel er det f.eks. forholdsvis let at fjerne alle bjergeffekter fra modellen eller at fjerne ismasserne og erstatte dem med vand af en passende temperatur. Det bedst kendte eksperiment af denne slags i klimamodeller er de simuleringer, der er foretaget med hensyn til betydningen af en ændret koncentration af kuldioxid i atmosfæren. Disse eksperimenter er i virkeligheden følsomhedseksperimenter, men de er naturligvis blevet udført, fordi man har observeret en voksende mængde af kuldioxid i atmosfæren. Man anslår, at koncentrationen er vokset med 25% siden begyndelsen på den industrielle tidsalder. Det er naturligvis også udmærket, at man nu ved fra de bedste af disse modeller, at effekten vil blive en temperaturøgning på ca. 0.5 grader i den globale middeltemperatur med større ændringer nær ved

polerne og næsten ingen ændring på de lave breddegrader. Det uansvarlige i brugen af disse resultater i visse klima- og miljøsektorer er, at man forventer, at disse simulerede temperaturændringer virkeligt vil indtræffe. Klimaet har for det første en observeret ændring, som ligger i systemet selv, d.v.s. den såkaldte naturlige klimavariation. For det andet har klimaobservationerne ikke vist en stadig stigning af temperaturen i de sidste 250 år. Der har været mange temperaturændringer, som ikke kan tilskrives ændringer i kuldioxydmængden som f.eks. det fald i den globale middeltemperatur, som fandt sted mellem ca. 1940 og 1970. For det tredje er der en række tilbagekoblingsmekanismer, som ikke er taget med i modellerne, og de kunne have den modsatte virkning på temperaturen. Nu skal denne artikel ikke dreje sig om den såkaldte drivhuseffekt, men den er nævnt her som et eksempel på den forsigtige anvendelse, som man bør gøre af sådanne eksperimenter.

Lidt videnskabsteori.

Computeren finder stadig større anvendelse i mange grene af videnskaben. Den er et alment værktøj, som kan bruges til mangfoldige formål, men den er naturligvis aldrig bedre end den realitet, som findes i de modeller, som er blevet opfundet på grundlag af vor nuværende viden på et bestemt område. Den kan bruges til at simulere processer i en bestemt teori, men kan også bruges til at efterligne opførslen af et virkeligt system. Hvis den simulerede opførsel er nær ved den virkelige opførsel, som observeret af data fra naturen eller et laboratorieeksperiment, kan man, hvis behovet eksisterer, overføre modellen til anvendelsesområdet, hvor modellen kan anvendes i de praktiske forudsigelser. Der vil den så eksistere, indtil forskningen har produceret en endnu bedre simulations- eller prognosemodel.

Ny og dybere indsigt er opnået gennem computersimuleringer af fysiske, kemiske og biologiske processer. Enkelte eksempler fra atmosfærefysikken er nævnt i de tidligere afsnit, men mange flere eksempler kunne gives fra de forskellige videnskabsgrene. Man har sammenlignet anvendelsen af computeren med et laboratorieeksperiment. De har i hvert fald det tilfælles, at man i begge tilfælde må gå igennem omhyggelig planlægning, foretage en ligeså omhyggelig "opstilling" og stille en række spørgsmål, som muligvis kan besvares af "eksperimentet". De er dog også forskellige, fordi man i laboratoriet - i hvert fald i visse tilfælde - har at gøre med den virkelige verden, medens modellen i computeren kun kan indeholde enten, hvad vi ved, eller noget, som vi gerne vil prøve, og i det sidste tilfælde må man så gå til naturen eller til laboratoriet for at se om simuleringen er i orden. Computersimuleringer kan således ikke erstatte den eksperimentelle videnskab i almindelighed, men den kan være det *eneste* værktøj, som står til rådighed i visse videnskabsgrene, hvor laboratorieforsøg ikke kan udføres på

realistisk måde.

Eksempler på den sidste situation finder vi typisk i de videnskabsgrene, hvor man beskæftiger sig med de virkeligt store systemer, som ikke kan bringes ind i laboratoriet (geovidenskaberne og astrofysikken er eksempler). Disse store systemer kan til nød observeres, men vi kan ikke på realistisk måde lave gode forsøgsoptstillinger. Der har f.eks. i mange år været forsøg på at simulere atmosfærens og havenes strømninger i laboratoriet. Man kan komme et godt stykke på vej, og man kan med roterende kar på primitiv måde demonstrere visse aspekter af cirkulationen, men man kan ikke efterligne det virkelige tyngdefelt, der er parallelt i laboratoriet, men centralt på jorden. Sky- og nedbørsprocesser lader sig ikke simulere i laboratoriet. Strålingbudgettet afhænger af skyerne og deres bevægelse, så også denne proces mangler. Det er af disse grunde, at de laboratorier, der har eksisteret i geofysisk fluidmekanik, er lukket eller fører en kummerlig tilværelse. Man vil derfor forstå, at for de videnskaber, hvor realistiske forsøgsoptstillinger ikke kan skabes, bliver computeren næsten det eneste værktøj, der findes. Dertil kommer, at visse af disse videnskabssområder næsten udelukkende foregår i den ikke-lineære verden, hvor sædvanlige matematiske metoder ikke rækker langt. Igen er der områder, hvor man forsøger at omgå de ikke-lineære processer ved de såkaldte parametriseringer, men medens sådanne heuristiske metoder kan bruges til demonstration af visse effekter på skematisk måde, er de aldrig det sidste ord i sagen.

Den meget hurtige udvikling af computeren både i kapacitet og hastighed er derfor meget velkommen i de videnskabsgrene, hvor man er så afhængig af den. Den almindelige indsigt, som man har fået over de sidste 40 år, i computersimuleringer har været en læreproces, selv om man gang på gang har måttet resignere, fordi man ikke kunne komme nærmere på naturen på grund af manglende computerressourcer. Læreprocessen har imidlertid afklaret en stor del af de problemer af principiel natur, som findes i computerfysikken, men netop fordi dette er sket, er appetitten for endnu bedre computere øget med ønsket om at komme endnu nærmere på de virkelige systemer.



Aksel Wiin Nielsen. dr.scient.
h.c. Professor i dynamisk
meteorologi ved Niels Bohr
Institutet for Astronomi, Fysik
og Geofysik, Københavns
Universitet.

Computeren som laboratorium

Henrik Jeldtoft Jensen, Imperial College, London University

I efteråret 1986 befandt jeg mig på McMaster University i Hamilton lidt syd for Toronto. Jeg sad og kiggede ud igennem vinduet på universitetets kernereaktor, som mindre betryggende befandt sig lige udenfor mit kontorvindue (nu er den lukket), da min chef A.J. Berlinsky kom ind på kontoret slæbende på en stor kasse. Kassen indeholdt en PC, som Berlinsky netop havde købt for at være sikker på, at jeg ikke var uden computer. Dette blev begyndelsen på et langt forskningsprojekt, som ved hjælp af computersimuleringer har studeret systemer med uorden.

Mit kendskab til computere begrænsede sig i 1986 til et par beregninger af nogle hidsige integraler, som jeg ikke havde kunnet reducere helt tilbunds i hånden. Alt mit tidligere arbejde havde begrænset sig til analytiske (d.v.s. håndregning) undersøgelser af de fysiske systemer, jeg havde kigget på. Dette var jeg såmænd nok fortsat med, hvis ikke Berlinsky var kommet slæbende med den PC. Da jeg nu pludselig havde egen computer, forekom det mig oplagt at benytte den til at studere de systemer, som jeg havde beskæftiget mig med, siden jeg kom til McMaster.

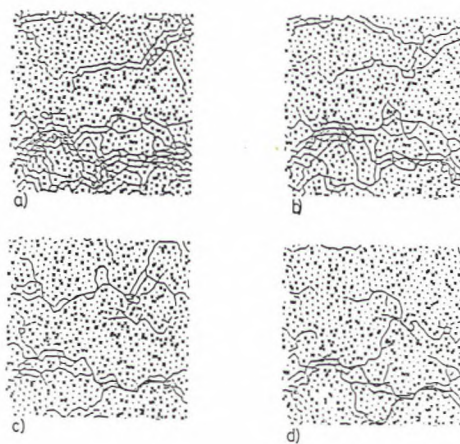


Figur 1. Skitse af en elastisk kæde i et tilfældigt baggrundspotential.

Det drejede sig om elastiske gitter placeret i et uordnet baggrundspotential. Tænk på en kæde af kugler forbundet med fjedre lagt hen over et bakkelandskab. Se fig. 1. Dette problem er relevant for forståelsen af så forskellige problemer som supraleders magnetiske egenskaber og almindelig gnidning mellem to overflader. Der var i 1986 udført, og der bliver fortsat udført, meget analytisk arbejde i bestræbelse på at forstå, hvorledes det elastiske gitter reagerer på baggrundspotentialet. Matematikken anvendt i disse beregninger er ikke specielt vanskelig, men alligevel er beregningerne ofte problematiske. Dette skyldes at selv et svagt baggrundspotential har en dramatisk effekt på det elastiske gitters opførsel. Man kan derfor ofte ikke stole på perturbative beregninger, d.v.s. beregninger, hvor man som udgangspunkt tager det ideale gitter og så antager, at et svagt baggrundspotential kun modificerer gitterets

egenskaber en lille smule.

Jeg havde selv tænkt mig at udføre lignende håndberegninger. Disse blev nu lagt på hylden en tid, mens jeg kastede mig ud i computernes finurlige verden. Og det viste sig at være en heldig beslutning. Vi skal nedenfor se eksempler på at gitteret brækker, at der opstår diskontinuiteter, og alskens andre overraskende ting, når et stort gitter placeres i selv et meget svagt baggrundspotential. Disse effekter ville have været yderst svære at opdage ved hjælp af håndregning, men man kan muligvis udvikle en matematisk formalisme, som kan beskrive dem, når man først har erkendt deres eksistens.



Figur 2. Partikelbaner (de optrukne linier) for et todimensionalt gitter i et tilfældigt potential. Krydsene angiver lokale minima i potentialen, prikker angiver partikler, som ikke har bevæget sig. De lokale minima gøres gradvist dybere, når man går fra fig. a) til d)

Kun min totale mangel på erfaring forklarer, at jeg troede, jeg kunne bruge den nye PC til den slags arbejde. Opgaven er ligetil at formulere. Brug computeren til at løse Newtons ligninger for gitterets partikler og se så, hvad der sker. Altså! Tag et antal partikler. Lad dem vekselvirke med hverandre, de kan for eksempel alle være frastødende. Man må så putte dem i en beholder, eller på anden måde sørge for at de ikke blot løber uendeligt lagt væk fra hinanden. Hvis partiklernes kinetiske energi er lille, vil de organisere sig i et ordnet gitter. Nu skruer vi op for det uordnede baggrundspotential og ser, hvad der sker. Vi bruger computeren til i små tidsskridt, at integrere bevægelsesligningerne for partiklerne. Partiklernes totale kinetiske energi kan fortolkes som systemets temperatur. Således kan vi studere, hvorledes systemets opførsel afhænger af temperaturen og styrken af baggrundspotentialet. Vi kan også undersøge, hvad der sker, dersom vi forsøger at skubbe partiklerne henover

baggrundspotentialet ved at lade en ydre drivkraft virke på partiklerne.

På computeren kan vi lave alle de *gedankeneksperimenter* vi har fantasi til at udtænke. Vi bestemmer selv præcis, hvilke kræfter vi ønsker at inkludere. Effekter, som ikke lader sig adskille i rigtige eksperimenter, kan studeres enkeltvis for senere at blive adderet sammem. Alt kan lade sig simulere på computeren, vi kan designe verden nøjagtigt, som vi ønsker den.

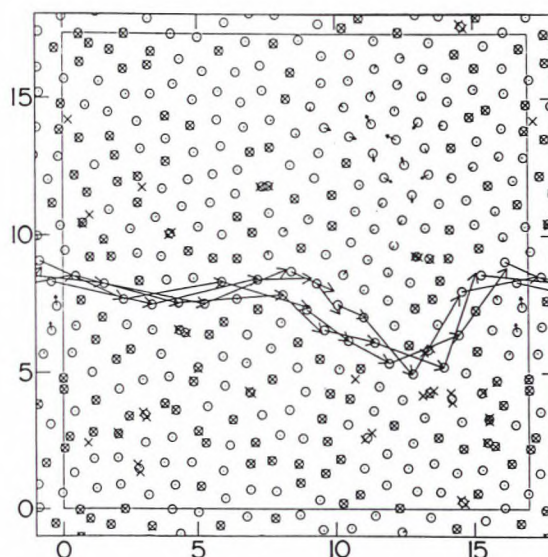
Dog, der er en begrænsning: computerens størrelse. Min PC kom aldrig til at lave andet for mig end at fungere som terminal, når jeg igennem den arbejdede på mere voksne maskiner. Først forsøgte jeg at køre mine programmer på en af McMasters main frame computere, d.v.s. den centrale computer som hele naturvidenskab brugte til alt mellem himmel og jord; men især til tekstbehandling. Det gik ikke. Jeg kunne køre nat efter nat på denne maskine (en stor VAX) med det eneste resultat at Berlinskys computerkonto blev drænet med forbløffende hastighed. Nu var det så heldigt, at McMaster havde en gammel supercomputer fra Floating Point Systems (FPS) stående. Den købte Berlinsky en stor brøkdel af. Det hjalp væsentligt. Den kunne i nogen grad vektoriseres (se senere) og programmerne begyndte nu at køre så hurtigt, at det var brugbart. Men selv om vi kørte i hundredevis af timer, var der fortsat mange flere simulationer vi gerne ville køre, end vi kunne få tid til. Enden blev, at vi fik nogle hundrede timers Cray regnetid på Torontos *Center for Large Scale Computing*. Det holdt os kørende en tid. På denne maskine kørte programmerne mere end hundrede gange hurtigere end de oprindelige programmer havde gjort på McMasters VAX.

Det er ikke kun for at opnå overkommelige regnetider, man skal bruge supercomputere, det er også for at kunne simulere tilstrækkeligt store systemer. Ved alle computersimulationer er det vigtigt at få klarhed over, hvorledes de effekter, man iagttager i sine numeriske eksperimenter, afhænger af partikelantallet i de simulerede systemer. Man vil gerne være i stand til at ekstrapolere til uendeligt store systemer. Derfor må den benyttede computer have tilstrækkelig stor hukommelse til, at man kan betragte systemer op til en betydelig størrelse. Hastighed og hukommelse er ofte lige væsentlige for valget af en supercomputer.

Det er ikke svært at programmere og køre på store computere. Ofte er den sværeste del af opgaven at udfylde ansøgningerne om regnetid. Det centrale begreb ved udvikling af programmer for store datamater er vektorisering eller parallelisering. Det betyder i vort eksempel med partiklerne, at istedet for at behandle partiklerne en efter en, regner man på dem alle på engang. Når man skriver programmer for gammeldags serielle computere, har man vænnet sig til at bryde opgaven ned i småbidder på en måde så man gør sig færdig med partikel nummer et, før man går til partikel nummer to. D.v.s. man beregner først alle afstande til de partikler, som nummer et vekselvirker med. Fra disse afstande finder man kræfterne på partikel et. Fra kræfterne bestemmer man ændringen i partikelens

position, hvorefter man flytter den hen til den nye position. Først da går man igang med at beregne afstande, kræfter og positionsændring for partikel to, o.s.v.

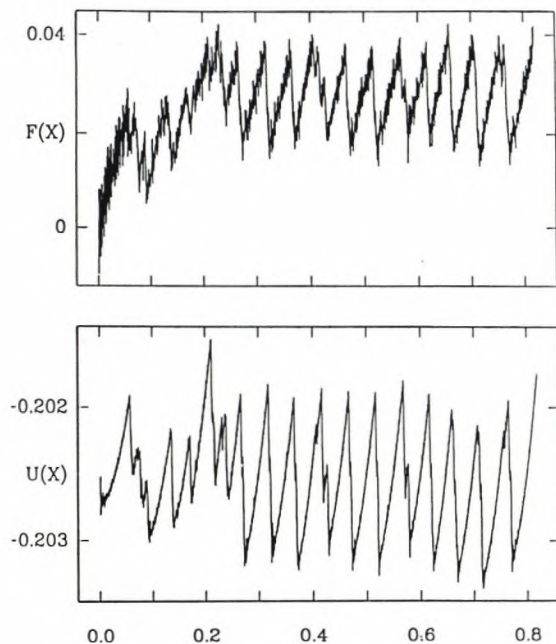
Der er ikke noget som helst helligt i denne opdeling af problemet. Den kommer simpelt hen af, at maskinerne kun havde en enkelt processor, som tog sig af alle beregninger. Vektorprocessorer og parallelprocessorer har mange regneenheder som arbejder side om side. Nu drejer det sig om at strukturere sit program, så alle processorer er i fuld sving hele tiden. For vektorprocessorer som for eksempel Cray-maskiner gøres dette ved, at man i stedet for at tage en partikel ad gangen, udfører en beregning tilbunds ad gangen. Først beregner man *alle* afstande mellem *alle* vekselvirkende partikler. Så beregner man *alle* de afledte kræfter for *alle* partikler og til slut beregnes *alle* positionsændringer. For parallelprocessorer kan man for eksempel dele problemet op således, at hver processor er ansvarlig for sit delvolumen. Processoren foretager så samtlige beregninger vedrørende de partikler, som på et givent tidspunkt befinder sig indenfor dette volumen.



Figur 3. Et mere detaljeret billede af samme fænomen, som vist i fig.2

Effektiv programmering af supercomputere lettes meget af at maskinernes programoversættere er lavet således, at de fortæller, hvor lang tid maskinen bruger på de enkelte programdele. Så ved man med det samme, hvor man skal koncentrere sine betragtninger på optimering. Man kommer langt med et program i almindelig standard FORTRAN, som er struktureret med henblik på vektorisering. Man kan så bede maskinen om at optimere programmet for én. Og det kan der komme forbløffende hurtige programmer ud af. Endnu hurtigere programmer opnår man ved at benytte maskinens bibliotek med specialdesignede vektorrutiner. Nogle parallelprocessorer kræver specielle programsprog, men de venligtsindede maskiner kan generere en rimelig kode ud fra et program skrevet i standard FORTRAN. Så det er faktisk nemt at

bruge supercomputere. Man kan starte med sin gamle oldemors støvede FORTRAN programmer og så gradvis udvikle og optimere dem.



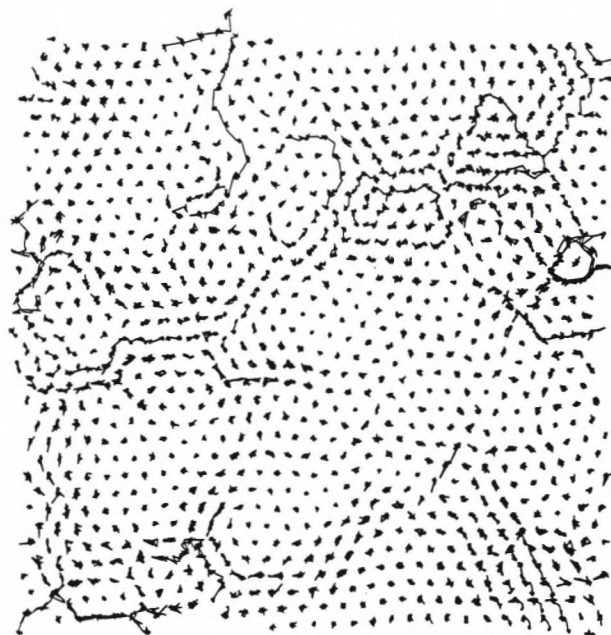
Figur 4. Variationerne i den totale kraft, $F(X)$, og den totale energi, $U(X)$, for systemet vist i fig. 2. Den vandrette akse angiver positionen af partiklernes massemidtunkt.

Lad os nu til slut vende tilbage til gitteret i det tilfældige baggrunds potential. Jeg vil beskrive et par af de computereksperimenter, som vi udførte. Først systemets opførsel ved temperaturen nul. Kig på fig. 2. Her har vi vist banerne for de enkelte partikler i en simulation, hvor vi ved hjælp af en ydre kraft har tvunget systemets massemidtunkt til at bevæge sig to gange gitterafstanden i det perfekte gitter. Gitteret bevæger sig ikke som et stift legeme. Baggrundspotentialet har brækket gitteret. De små krydser på figuren angiver positionen af minima i baggrunds potentialet. Prikkerne er partikler som er fanget i potentialen og derfor ikke har bevæget sig. Systemet er ækvivalent med det i fig. 1, blot er der her tale om et todimensionalt system. Man ser, at systemet bryder op i kanaler, hvori partikler bevæger sig, adskilt af øer bestående af fastlåste partikler. Fig. 2a) til 2d) viser, hvorledes kanalerne, snævrer ind efterhånden som styrken af baggrundspotentialet forøges. Det overraskende er, at et stort system vil bryde op i kanaler så snart baggrundspotentialets styrke er forskellig fra nul. Tidligere antog man, at for svage baggrundspotentialer ville gitteret bevæge sig som en helhed, kun udsat for mindre elastiske deformationer.

Fig. 3 viser endnu et eksempel på kanalbevægelse. I fig. 4 er vist, hvorledes den totale kraft, som baggrundspotentialet i fig. 3 udsætter partiklerne for, varierer som funktion af systemets massemidtunkt. Systemets totale energi er også vist på figuren. Begge størrelser ses at variere yderst diskontinuert. Dette er et eksempel på de

diskontinuiteter og instabiliteter, som gør det svært at lave analytiske beregninger på disse systemer.

Endelig i fig. 5 viser vi, hvorledes gitteret smelter, når det er placeret i det tilfældige baggrundspotential. Man ser endnu engang at systemet danner kanaler. Det morsomme ved denne simulering var, at den viste, at et meget svagt baggrundspotential *sænker* smeltepunktet. Man kunne måske have troet, at baggrundspotentialet ville have gjort partiklernes bevægelse vanskeligere, og dermed have hævet smeltetemperaturen. Men simulationerne viste det modsatte. Et svagt baggrundspotential virker blødgørende på gitteret.



Figur 5. Smeltning af et gitter i et tilfældigt baggrundspotential. Partiklernes baner er vist.

Eventuelt interesserede kan læse mere om disse ting i referencerne givet efter artiklen.

Vi opdagede mange tidligere upåagtede effekter, som nok ville være forblevet upåagtede endnu en tid, dersom vi ikke havde haft den megen regnekraft. Det er formodentlig tilfældet for rigtig mange af de projekter, som blev kørt på FPS Maskinen og Torontos Cray. Nu er Floating Point Systems gået bankerot og Torontos Center for Large Scale Computing lukket! En væsentlig begrænsning ved vore simulationer i Canada, var, at de alle var for todimensionale gitre. Med henblik på supralederes magnetiske egenskaber er man meget interesseret i, hvorledes et system bestående af vekselvirkende elastiske strenge opfører sig, når det placeres i et tre-dimensionalt tilfældigt gitter. Det problem kræver væsentlig mere regnekraft end det todimensionale problem gjorde; men maskinerne er også blevet væsentligt kraftigere i løbet af de seneste par år, så det skulle nu være realistisk at putte dette problem på en af Storbritanniens supercomputere.

Referencer:

- 1) H.J. Jensen, A. Brass, and A.J. Berlinsky, *Lattice Deformations and Plastic Flow through Bottlenecks in a Two-Dimensional Model for Flux Pinning in Type-II Superconductors*. Phys. Rev. Lett. **60**, 1676 (1988).
- 2) H.J. Jensen, *Two-Dimensional Aspects of Pinning in High Temperature Superconductors*. Supercond. Sci. Technol. **5**, S141-S144 (1992).



Henrik Jeldtoft Jensen
Cand. scient. 1983 og Ph.d. 1986 fra Århus Universitet i teoretisk fysik. Arbejdede 1986-88 ved McMaster University i Canada. Derefter tre år på NORDITA fulgt af et enkelt år på Niels Bohr Institutet. Nu lektor ved Imperial College, London University. Hovedinteresser: statistisk fysik af komplekse systemer: supralederes magnetiske egenskaber, friktion, sandbunker og lignende.

MODERNE VAKUUMTEKNIK TIL FORSKNING OG INDUSTRI



ALCATEL 2-trins pumbers succes giver uændrede priser i 1993.

Type	Kapacitet m ³ h ⁻¹ nominel/Pneurop	Sluttryk hPa (mbar) partial/total/+gasballast	Pris kr. excl. moms
2002	2,0 / 1,7	<2x10 ⁻³ / <5x10 ⁻³ / <2x10 ⁻²	8.075,-
2005	5,4 / 4,8	<1x10 ⁻⁴ / <2x10 ⁻³ / <1x10 ⁻²	12.550,-
2010	9,7 / 8,5	<1x10 ⁻⁴ / <2x10 ⁻³ / <1x10 ⁻²	14.500,-
2015	15,0 / 12,5	<1x10 ⁻⁴ / <2x10 ⁻³ / <1x10 ⁻²	15.850,-
2021	20,7 / 16,5	<1x10 ⁻⁴ / <2x10 ⁻³ / <1x10 ⁻²	19.450,-
2033	35,0 / 30,0	<1x10 ⁻⁴ / <3x10 ⁻³ / <6x10 ⁻³	25.500,-
2063	65,0 / 60,0	<2x10 ⁻⁴ / <3x10 ⁻³ / <6x10 ⁻³	39.650,-
2100	120,0 / 105,0	<2x10 ⁻⁴ / <3x10 ⁻³ / <6x10 ⁻³	83.775,-

* robuste * tryksmurte * støjsvage * indbygningsvenlige * specialudførelser for korrosive gasser * reservedele og service i DK.

ALLE FORMER FOR OLIEFRI & OLIESMURTE ROTATIONSVAKUUMPUMPER • FEDTSMURTE TURBOMOLEKULAR- SPIRO- & HYBRIDPUMPER • DIFFUSIONS- & CRYOPUMPER • VAKUUMMÅLEINSTRUMENTER, VENTILER, HV & UHV FITTINGS • HELIUMLÆKSØGERE & MASSESPEKTROMETRE • SPUTTER- ELEKTRONKANON- & ÆTSEANLÆG • RF & HV STRØMFORSYNINGER • RUSTFRI SPECIALKAMRE & DELE • OMBYGNING AF VAKUUMANLÆG

WENZEL VAKUUM TEKNIK APS NYBROVEJ 283 DK-2800 LYNGBY TLF 45 87 97 35
SHOWROOM, SERVICE, LAGER NYBROVEJ 193 BIL 30 42 63 00 FAX 45 93 32 93

Computeren som værktøj i statistisk fysik

Ole G. Mouritsen, Fysisk Kemisk Institut, DTH

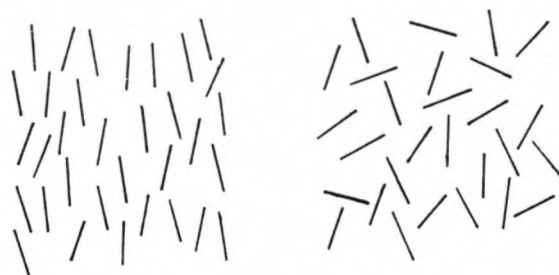
Om simuleringsfysik med et eksempel om flydende krystaller

'Computational physics' og 'simulational physics'

Næppe nogen anden enkelt opfindelse har som den elektroniske computer haft en så markant og gennemgribende indflydelse på det fulde spektrum af eksperimentelle og teoretiske discipliner inden for fysikken. Dette gælder de grundvidenskabelige såvel som de mere anvendelsesprægede og tekniske fagområder af fysikken. En særlig bemærkelsesværdig rolle har computeren fået i computersimulering, hvor computeren udnyttes som et numerisk-eksperimentelt værktøj til at simulere og undersøge modeller af fysiske fænomener. Computersimulering indtager en særegen position mellem de traditionelle eksperimentelle og teoretiske metoder og er derfor af mange forskere blevet betegnet som 'den tredje naturvidenskab'. Computersimulering stiller meget store krav til computerens kapacitet. Betydningen af computersimulering for naturvidenskab i almindelighed og for fysik i særdeleshed vokser derfor i takt med, at der udvikles stadig større og hurtigere computere. Computersimulering inden for fysikken vil derfor til enhver tid kræve adgang til tidens 'supercomputere.' Hvad der i en given situation kan betegnes som en supercomputer vil i en vis udstrækning afhænge af den givne problemstilling. For nogle problemer vil computere, som bygger på parallel eller vektoriel processering, have status som supercomputere. For andre problemer, er en seriel, moderne workstation stadig konkurrencedygtig i forhold til de institutionaliserede supercomputere.

Computersimulering benyttes ofte til numerisk at løse de matematiske vanskeligheder, som er forbundet med en teoretisk beskrivelse af komplekse mangepartikelproblemer i statistisk fysik. Ved computersimuleringen forsøger man, med udgangspunkt i fundamentale lovmæssigheder, at efterligne et systems opførsel i tid og rum. Computersimuleringen tilvejebringer så at sige den direkte forbindelse mellem den mikroskopiske og den makroskopiske (termodynamiske) naturbeskrivelse og giver dermed en speciel mulighed for detaljerede studier af modelsystemer på det molekylære plan. Computeren anvendes således på en utraditionel måde som et eksperimentelt værktøj, og de opnåede resultater er nyttige både til efterprøvnig af teoretiske approksimationer og forudsigelser, til opstilling af nye modeller og til opnåelse af numerisk-eksperimentel information af en type, som er vanskeligt tilgængelig ved hjælp af traditionelle eksperimentelle teknikker.

Det ikke alt for velklingende udtryk 'simuleringsfysik' ('simulational physics') benyttes nu ofte til at betegne den specielle numerisk-eksperimentelle tilgangsvinkel til fysiske problemstillinger, som computersimulering er. 'Simulational physics' er ikke synonymt med 'computational physics,' der mere bredt dækker alle de beregningsmetoder inden for fysikken, som forudsætter massiv brug af computerberegninger (for eksempel også 'simpel' formelberegning). Simuleringsfysik er selvfølgelig ikke en særlig slags fysik. Man kunne måske snarere sige, at det at dyrke simuleringsfysik er en speciel uforfærdet (nogle vil sige naiv) måde at begive sig i kast med nogle af de mere vanskelige problemer inden for fysikken, som i øjeblikket unddrager sig en analytisk løsning. Gennem simuleringsfysikken er det imidlertid ofte muligt at opnå essentiel ny indsigt i et givet problem og, som det måske allervigtigste, at få en god ide om, hvilke spørgsmål, der er interessante at stille til en given problemstilling. Det er ofte blevet sagt, at den mest succesfulde computersimulering er den, som er med til at overflødiggøre sig selv ved at bane vej for nye modeller og teorier, samt ved at give gode forslag til nye eksperimenter.



Nematisk fase

Isotrop fase

Figur 1. Schematisk illustration af orienteringen af nematogene molekyler i den ordnede (nematisk) og den uordnede (isotrop) fase. Den nematiske-isotrope faseovergang forbinder de to faser.

Specielt inden for den statistiske fysik er computersimulering blevet et hovedværktøj og et standard redskab i teoretikerens værktøjskasse. Dette gælder især til studier af ikke-trivielle kooperative effekter i mange-partikelsystemer. Den statistiske fysik har især gjort fremskridt i kraft af begreber som scaling og universalitet, hvilket i princippet betyder, at man kan opnå den essen-

tielle fysiske forståelse af en problemstilling ved at studere den simplest mulige model inden for den pågældende universalitetsklasse. Nutidens hurtige computere, sammen med de simuleringsmetoder, der er udviklet fra studiet af simple modeller, har imidlertid også muliggjort mere tekniske og ingeniørmæssige anvendelser af computersimulering, hvor interessen i højere grad er at bestemme detaljerede materialparametre for systemer og fænomener, for hvilke fysikken stort set er kendt. Computersimulering af denne type har i de senere år fået betydning ved for eksempel rationel design af nye materialer og ved syntese af makromolekyler såsom proteiner.

Den stærkt voksende brug af computersimulering inden for fysikken kan man se ved at gennemblade de 'store' fysiktidsskrifter som *Physical Review Letters* og *Physical Review*, hvori en meget stor del af de teoretiske artikler nu omhandler resultater, der er opnået ved computersimulering. Der er ingen vej uden om – sådan er det! Hvad enten man kan lide computersimulering eller ej, må man erkende, at disse teknikker giver resultater. På godt og ondt er der i de senere år opstået specielle tidsskrifter inden for simuleringsfysik. *Molecular Simulation* har fungeret nogle år nu, og to nye tidsskrifter inden for materialfysik blev lanceret sidste år, *Computational Materials Science* og *Computer Methods in Materials Science and Engineering*.

Molekylærdynamiske metoder og Monte Carlo metoder

Vigtige computersimuleringsmetoder i statistisk mekanik omfatter *molekylærdynamiske metoder* og *Monte Carlo metoder*. Molekylærdynamiske metoder,¹ som i princippet består af numerisk integration af de koblede bevægelsesligninger for mangepartikelsystemer, har spillet en afgørende rolle i studiet af kondenserede fasers (især væskers) struktur og dynamik og anvendes nu i stigende grad til at undersøge faste stoffer og komplekse molekylære systemer. Udviklingen inden for molekylærdynamikken er indtil nu i vid udstrækning blevet ledet af forskere med let adgang til konventionelle supercomputere. Dette vil imidlertid ikke længere være tilfældet efterhånden som de molekylærdynamiske beregninger overføres til multiprocessorsystemer (f.eks. transputere), der direkte udnytter den algoritmiske parallelle karakter af de kraftberegninger, som dominerer konventionelle molekylærdynamiske beregninger.

Monte Carlo metoder¹ har i kraft af deres simple princip og generelle anvendelighed været af afgørende betydning for studiet af kooperative fænomener² i mangepartikelsystemer. Monte Carlo metoder bygger på stokastiske principper til beregning af de mange-dimensionale faserums-integraler, som indgår i den statistisk-mekaniske formalisme. Eksempelvis har disse metoder ført til væsentlig indsigt i de universelle aspekter af faseovergange og kritiske fænomener. Monte Carlo simuleringsmetoder anvendes ofte på systemer, der simpelthen er så komplekse, at ingen andre teoretiske til-

gangsvinkler har vist sig frugtbare. En speciel anvendelse finder sted inden for den type moderne fysik, som formuleres ved hjælp af algoritmer, for eksempel cellulære automater.

Den store styrke ved begge typer simuleringsmetoder som teoretiske værktøjer ligger i, at man har fuld kontrol over alle indgående approximationer, og at de i princippet er numerisk eksakte. Desuden giver de, eftersom alle de mikroskopiske variables værdier er direkte tilgængelige, adgang til alle korrelationsfunktioner og dermed fuldstændig information om systemet. Det sidstnævnte forhold har især betydning for studier af inhomogene systemer og systemer med mikro- eller nanostruktur. Endelig er simuleringsmetoderne andre metoder overlegne i studiet af stærkt fluktuerende eller temperatur-renormaliserede systemer af høj konformations-kompleksitet, hvor de effektive vekselvirkninger overvejende er entropiske.

Et eksempel: flydende krystallers fysik

Flydende krystaller er materialer, som de fleste af os kender fra hverdagen. Flydende krystaller har faseovergange, hvis egenskaber er vigtige for tekniske anvendelser i f.eks. displays, men som også er forbundet med spændende fysik.³ En af disse faseovergange er overgangen fra den nematiske (flydende krystallinske) fase til den isotrope fase, som er illustreret i fig.1. I den nematiske fase er molekylerne orienteret, og den makroskopiske orienteringsorden er beskrevet af en direktor, $\vec{n}$. Graden af nematisk orden er beskrevet ved en ordensparameter, ψ , som har værdier mellem 0 og 1. (Vi vil her beskrive den nematiske orden ved en skalar, selvom den i virkeligheden er en tensor). I den isotrope fase er molekylerne orientingsmæssigt uordnet som i en væskefase og $\psi = 0$. Den simpleste statistiske mekaniske model for den nematiske-isotrope faseovergang er den såkaldte Lebwohl-Lasher model, der er beskrevet ved en Hamiltonfunktion, som blot er et parpotential, hvori der indgår det andet Legendre polynomium i vinklen, θ_{ij} , mellem akserne for to nabomolekyler i og j

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (3 \cos^2 \theta_{ij} - 1), \quad (1)$$

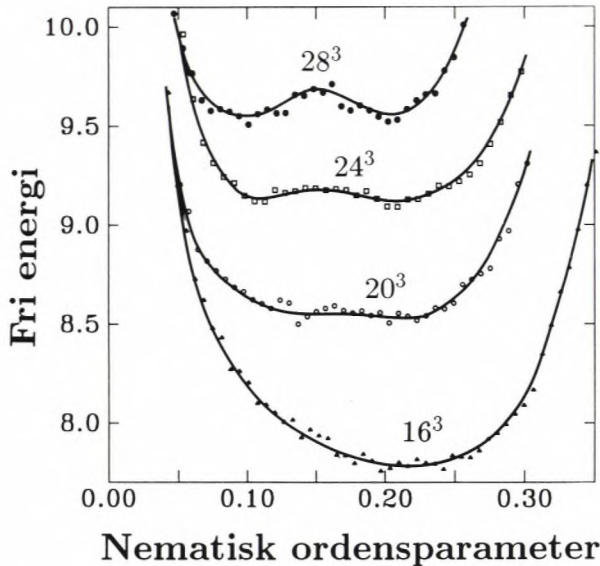
hvor J er en vekselvirkningskonstant. Modellen er defineret på et simpelt kubisk gitter.

Vi skal her bruge denne model til at vise, hvorledes man kan anvende Monte Carlo computersimulering til at bestemme naturen af den nematiske-isotrope faseovergang.⁴

Om at vende en ulempe til en fordel: finite-size scaling

Af indlysende grunde kan man i en computer kun simulere et fysisk system med et endeligt antal partikler. Dette frembyder et problem, fordi faseovergange i streng forstand kun forekommer i den termodynamiske grænse, dvs. for uendelig store systemer. Man kan imidlertid vende denne ulempe til en fordel ved systematisk

at studere, hvorledes simuleringsresultaterne afhænger af størrelsen af systemet og så benytte finite-size scaling teori til at uddrage information om den termodynamiske grænse. Finite-size scaling er et helt centralt begreb i analyse af data opnået ved computersimulering af effekter i mangepartikelsystemer. Computersimuleringsresultater, som ikke er undersøgt med finite-size scaling begreber, må man derfor betragte med en vis skepsis.



Figur 2. Computersimuleringsdata for det fri-energi funktional, $F(\psi)$, som funktion af ordensparameteren, ψ , vist for forskellige systemstørrelser ved en værdi af temperaturen svarende til den nematiske-isotrope faseovergang. Figuren viser, at der udvikles en barriere i den fri energi, når systemets størrelse vokser. Denne barriere, hvis størrelse svarer til grænsefladespændingen mellem de to faser, har en størrelsesafhængighed, som entydigt viser, at den nematiske-isotrope faseovergang er af første orden.

Den fri energi af et endeligt system af størrelse L^d , hvor d er den rumlige dimension, kan skrives

$$\mathcal{F}(L) = f_b L^d + f_s L^{d-1}, \quad (2)$$

hvor de to led svarer til bidrag fra henholdsvis bulk og overflade. Hvis vi eliminerer overfladen af det endelige system ved at pålægge det periodiske randbetingelser, kommer der kun bidrag til den andet led, hvis systemet har indre grænseflader, som det f.eks. forekommer ved fase separation. I så tilfælde svarer f_s til grænsefladespændingen mellem de to faser. Vi kan udnytte dette faktum ved analyse af computersimuleringsdata opnået for forskellige systemstørrelser til at bestemme naturen af en faseovergang.⁵ Hvis vi til rådighed har det fulde fri-energi funktional, $\mathcal{F}(\psi, L, T)$, hvor T er temperaturen (og her er læseren velkommen til at tænke på Landau's klassiske teori for faseovergange), og studerer formen af dette funktional ved faseovergangstemperaturen, $T_c(L)$, for den pågældende systemstørrelse, vil eksistensen af en grænseflade i systemet afsløres som en barriere mellem to lige dybe minima i $\mathcal{F}(\psi, L, T_c)$. Højden af denne barriere

vil variere som $\Delta\mathcal{F}(L, T_c) \sim L^{d-1}$ for en første-ordens faseovergang, vil gå mod en konstant for en kontinuert faseovergang (anden-ordens faseovergang, kritisk punkt) og vil gå mod nul, hvis der ingen faseovergang er i den termodynamiske grænse.

Tilbage står nu blot at afklare, hvorledes man kan få information om den fri energi fra en Monte Carlo simulering. Dette er et problem, fordi der ved simuleringen blot dannes et ensemble af mikrotilstande i faserummet, og kun fysiske størrelser, der er defineret som midelværdier over faserummet, kan beregnes herfra. Men den fri energi (og entropien) kan ikke skrives som en middelværdi over faserummet. Der er imidlertid en udvej til at beregne en del af den fri energi, som er tilstrækkelig til at bestemme den relative stabilitet af forskellige faser. Denne vej går over en bestemmelse af tæthedsfunktioner (eller tilstandstætheder), f.eks. for ordensparameteren $\mathcal{P}(\psi, L, T)$. Denne tæthedsfunktion angiver sandsynligheden for, ved temperaturen T , at finde en systemkonfiguration med en værdi, ψ , af ordensparameteren for et system af størrelsen L^d . Monte Carlo computersimulering kan direkte bruges til at beregne $\mathcal{P}(\psi, L, T)$ (og alle mulige andre tilstandstætheder). $\mathcal{P}(\psi, L, T)$ kan omformes til en fri-energi-agtig størrelse

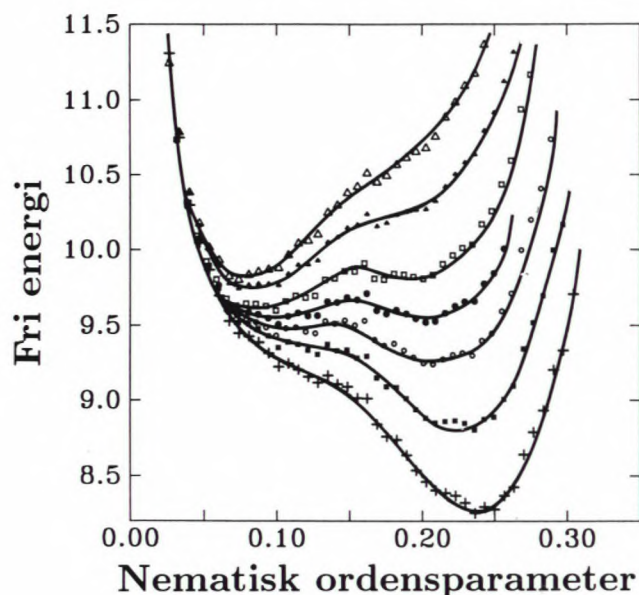
$$F(\psi, L, T) = -\ln \mathcal{P}(\psi, L, T), \quad (3)$$

som afviger fra den totale fri energi med en ukendt T - og L -afhængig størrelse. For faste værdier af T og L er differencer som $\Delta F(T, L) = F(\psi, L, T) - F(\psi', L, T) = \Delta\mathcal{F}(L, T)$ imidlertid korrekte mål for den relative stabilitet af tilstande (faser) med to forskellige værdier, ψ og ψ' , af ordensparameteren. Ved studier af størrelsesafhængigheden af simuleringsdata for $\Delta F(L, T)$ kan man derfor på basis af finite-size scaling teorien bestemme naturen af den nematiske-isotrope faseovergang.

I Fig. 2 er vist, hvorledes dette virker for simuleringsdata genereret for Lebwohl-Lasher modellen i (1). Når systemets størrelse vokser ses helt tydeligt, at der opstår en barriere, hvis højde vokser med systemstørrelsen. Dette er et utvetydigt tegn på en første-ordens faseovergang. Men vi kan faktisk gå et skridt videre og lære mere om fysikken nær faseovergangen.

For et system af fast størrelse ($L^3 = 28^3$) er vist i Fig. 3, hvorledes det fri-energi funktional, $\Delta F(\psi)$, opfører sig for en række temperaturer nær faseovergangen. Endnu en gang vil læseren have glæde af at erindre den kanoniske figur fra Landauteorien, som den er vist i enhver standardbog om statistisk fysik og termodynamik. I Fig. 3 er funktionalet imidlertid beregnet direkte fra en mikroskopisk model (1) og ikke fra den fænomenologiske Landauekspansion, $F \simeq F_0 + a(T)\psi^2 + b(T)\psi^3 + c(T)\psi^4 + \dots$. Figuren viser, hvorledes det ene af de to minima, som er lige dybe præcis ved faseovergangstemperaturen, $T_c(L)$, bliver til et lokalt minimum, når temperaturen ændres lidt. Det lokale minimum svarer til en metastabil tilstand. Der er en metastabil tilstand

på hver side af faseovergangen. Ændrer vi temperaturen yderligere væk fra $T_c(L)$, vil der på et tidspunkt ske det, at det lokale minimum falder sammen med det lokale maksimum, og den metastabile tilstand er blevet termodynamisk ustabil. Dette markerer et såkaldt spinodalt punkt, som bestemmer stabilitetsgrænsen af den ene fase inden i den anden. De to spinodale punkter for den nematisk-isotrope faseovergang ligger meget tæt på ligevægtsfaseovergangen. Faseovergangen er derfor af meget svag første orden, hvilket er i overensstemmelse med eksperimentelle målinger på flydende krystaller.



Figur 3. Computersimuleringsdata for det fri-energi funktional, $F(\psi)$, som funktion af ordensparameteren, ψ , vist for et system af størrelsen $L^3 = 28^3$ ved en række temperaturer nær den nematisk-isotrope faseovergang. Den totale temperaturvariation er under en tiendedel af en procent. Figuren viser den karakteristiske opførsel svarende til fasekoeksistens, metastabilitet og spinodal opførsel.

Nogle beregningsmæssige detaljer:

At udføre Monte Carlo simuleringer af en type, der bygger på beregning af tæthedsfunktioner, forudsætter en statistik, som typisk er en størrelsesorden mere omfattende, end den, der benyttes ved konventionelle Monte Carlo simuleringer af faseovergange i statistisk fysik. Der er imidlertid forskellige tricks man kan bruge til at udnytte de genererede datamængder optimalt. For eksempel kan man

benytte den såkaldte histogramteknik,⁶ som involverer Boltzmann transformation af tæthedsfunktionerne fra én temperaturværdi til en anden. Histogramteknikken blev f.eks. benyttet til beregningen af kurverne i fig.3.

Da den statistiske mekaniske model, som vi har betragtet her, er defineret på et gitter, er det i princippet simpelt at vektorisere eller parallelisere beregningerne. Gitteret opdeles simpelthen i et passende antal ækvivalente undergitter, som kan behandles parallelt. Resultaterne vist i fig.2 og 3 er opnået ved brug af såvel UNI-Cs CM-200 Connection Machine samt en HP 750 workstation. CM-200 giver typisk en forøgelse i regnehastighed med en faktor 30–50. En tilsvarende faktor er opnået for andre statistiske mekaniske gittermodeller med lokale vekselvirkninger.

Referencer:

- 1) D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods*, Springer-Verlag, Heidelberg (1986)
- 2) O. G. Mouritsen, *Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena*, Springer-Verlag, Heidelberg (1984)
- 3) P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon, Oxford (1974).
- 4) Z. Zhang, O. G. Mouritsen, and M. J. Zuckermann, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2803 (1992).
- 5) J. Lee and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 137 (1990).
- 6) A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).



Ole G. Mouritsen dr.scient. professor i fysisk kemi ved Danmarks Tekniske Højskole, Lyngby. Arbejder med statistisk fysik og computersimulering anvendt på områderne membraner, komplekse væsker, faseovergange i faste stoffer og på overflader, ordningsprocesser og systemer fjernt fra ligevægt.



LASERE • ELEKTROOPTIK • FIBER OPTIK • TESTUDSTYR • LASER TEKNIK

AGENTUR

ANDO
ATCOR
BIT
BURLEIGH
CYONICS
EG & G BERTHOLD
EG & G FIBER OPTICS
EG & G GAMMA SCIENTIFIC
EG & G OPTO-/JUDSON
EG & G ORTEC
EG & G PAR ECEM. DIV.
EG & G SCIENTIFIC. DIV.
EXCITON
EXFO
GENTEC
GOULD FIBER OPTICS
GRASEBY OPTRONICS (UDT)
ILEE
ILX LIGHTWAVE
JOBIN YVON
SPEX
KLINGER SCIENTIFIC
LASER PHOTONICS
LASER VISION
LSI
MALVERN
MICROCOATINGS
MICRO-CONTROLE
MOLETRON
NE-TECHNOLOGY
NEWPORT
OFR
PTI
QUANTA RAY
QUANTEX
QUESTEK
SANTEC
SEASTAR OPTICS
SPECTRA DIODE LABS
SPECTRA-PHYSICS
STORM FIBER OPTICS
UDT SENSORS INC.
UNIPHASE

ANDET:

LEVERINGSPROGRAM:

Fiberoptisk måleudstyr, Datakommunikations testudstyr.
Laser partikelmåling i luft og på overflader.
Fiberoptisk splidsudstyr.
Elektrooptisk analyseudstyr, FCL-Lasere, Scanning Tunnel Mikroskoper.
Luftkølede Argon Ion lasere.
Radioaktivitetsmåleudstyr for miljø og overvågning.
Fiberoptisk testudstyr for Strain og Dispersion.
Radiometrisk/fotometrisk måleudstyr.
LED/Laserdioder - detektorer - halvleder komponenter.
Nukleart forskningsudstyr og detektorer, NIM/CAMAC-elektronik, MCA/MCS systemer.
lektrokemisk måleudstyr for korrosion.
Lock-In forstærkere, Optiske Multikanal Analysatorer, magnetometre.
Laser Dyes.
Fiberoptisk testudstyr for LAN-FDDI-FTTH-FTTC-CATV.
Laser powermetre, pyroelektriske detektorer.
Fiberoptiske koblere, optiske isolatorer.
Optisk måleudstyr, Positionsudstyr - PSD, radio/fotometrisk måling.
Halvleder laserdioder for VIS/IR med drivere.
Instrumenter, TEC og drivere for laserdioder.
Monochromatorer, ramansystemer, optiske gitre.
Fluorometre, monochromatorer og Ramansystemer.
Positionering for DC og steppermotorer, optomekanik.
LASERE: Ruby, Alexandrite, Co, Co₂, XEHE, Nd:YAG/GLASS/YLF, Ho:YAG, ER:YAG.
Laserbeskyttelsesbriller og gardiner.
LN₂ lasere og dye lasere.
Laserbaseret partikelanalyseudstyr for luft/væske/pulver/spray/aerosoler.
Optiske interferensfiltre.
Optomekanik, optik, optiske bænke, granitborde og positionering.
Laser powermetre.
Radioaktivitetsmåleudstyr for overvågning og radiologi.
Elektro-optik, vibrationsdæmpende borde, optomekanik og optik.
Præcisionsoptik, optiske isolatorer, beam expanders og mikroskopobjektiver.
Lampesystemer, ratio fluorescence - phosphorescence systemer.
Nd:YAG lasere og dye-systemer.
IR - detektering.
Excimer lasere.
Tunbare halvleder lasere og image process systemer.
Pig-tailed laserdioder og drivere.
Halvleder lasere, høj effekt, CW og PULS, 780-870-910-980 nm.
Ion lasere og Ti:SA lasere og systemer for CW og PULS.
Fiberoptiske samleled, konnektorer, attenuatorer og PatchCabler.
PSD - Ge og Si detektorer.
HeNe lasere 0,5 - 50 mW. Halvleder lasere med gode beam kvaliteter.

Mærk af  og udfyld:

Navn: _____

Post nr. By: _____

Firmanavn: _____

Telefon: _____

Adresse: _____

Telefax: _____

Tag kopi af hele siden og fax den til: 31 19 87 47

Supercomputere og Astrofysik

Åke Nordlund Astronomisk Observatorium, NBI, Københavns Universitet

Fysikkens paradigmer

Det er vigtigt at være klar over, at fysikkens *paradigmer* (forklaringsmodeller; for tiden populære “kæpheste”) hænger nøje sammen med hvad for nogen værktøjer der til enhver tid står fysikken til rådighed. Værktøjerne bestemmer hvilken slags forklaringsmodeller man kan opstille og faktisk teste; afprøvning af en model forudsætter jo at den er “beregningsbar”. Den Newtonske mekanik, f.eks., blev muliggjort med udviklingen af differentialanalysen, og den oprindelige udvikling af feltteori og kvantemekanik var tæt knyttet til matematikkens udvikling i slutningen af 1800-tallet og begyndelsen af 1900-tallet. Idag påvirkes udviklingen indenfor f.eks. kaosteori, fluid mekanik, og astrofysik kraftigt af udviklingen indenfor computerteknologi og dertil hørende numeriske metoder. Meget af fremtidens udvikling indenfor fysik kan forventes at hænge sammen med den videre udvikling af bl.a. massivt parallelle supercomputere, som vil gøre det muligt at angribe problemer der endnu ligger udenfor grænsen for det praktisk håndterbare (i USA ofte benævnt “Grand Challenges”).

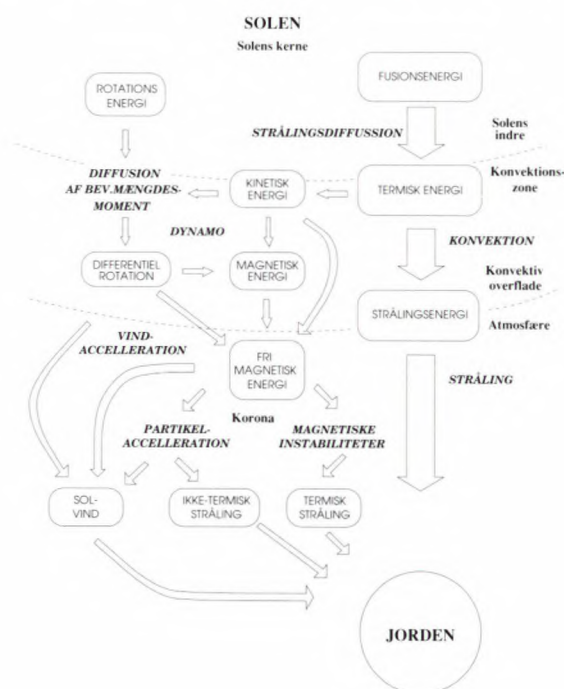
I nogle tilfælde kan supercomputere bruges til direkte at finde svar på komplicerede problemer, f.eks. beregning af numeriske løsninger på komplicerede ligningssystemer, hvor løsningen er et direkte svar på et relevant fysisk spørgsmål. Ofte bruges supercomputere imidlertid på en måde som minder om laboratorieeksperimenter, eller om observationer af komplicerede fysiske systemer. På basis af kendte fysiske principper kan man konstruere numeriske modeller af komplicerede fysiske systemer. Numeriske eksperimenter (“simulationer”) udført med sådanne modeller kan bruges på samme måde som laboratorieeksperimenter, nemlig som idégrundlag for en kvalitativ forståelse af det fysiske system, og til afprøvning af teorier opstillet på basis af en sådan forståelse.

En væsentlig årsag til at supercomputersimuleringer har vist sig så frugtbare, er at realistiske fysiske systemer som regel *er* meget komplicerede, i den forstand at de opviser en kaotisk opførsel. Dette forbyr måske den “klassiske” fysiker mere end almindelige mennesker. Hverdagen er fuld af kaotiske fænomener som vejr og vind, strømmende vand, eller det politisk / økonomiske system. Kun få systemer opviser den enkelhed og regelmæssighed, som karakteriserer den traditionelle fysik.

Computersimuleringer og Astrofysik

Også indenfor astrofysikken er virkeligheden ofte langt mere kompliceret end der kan tages højde for med enkle, analytiske modeller. Detaljerede observa-

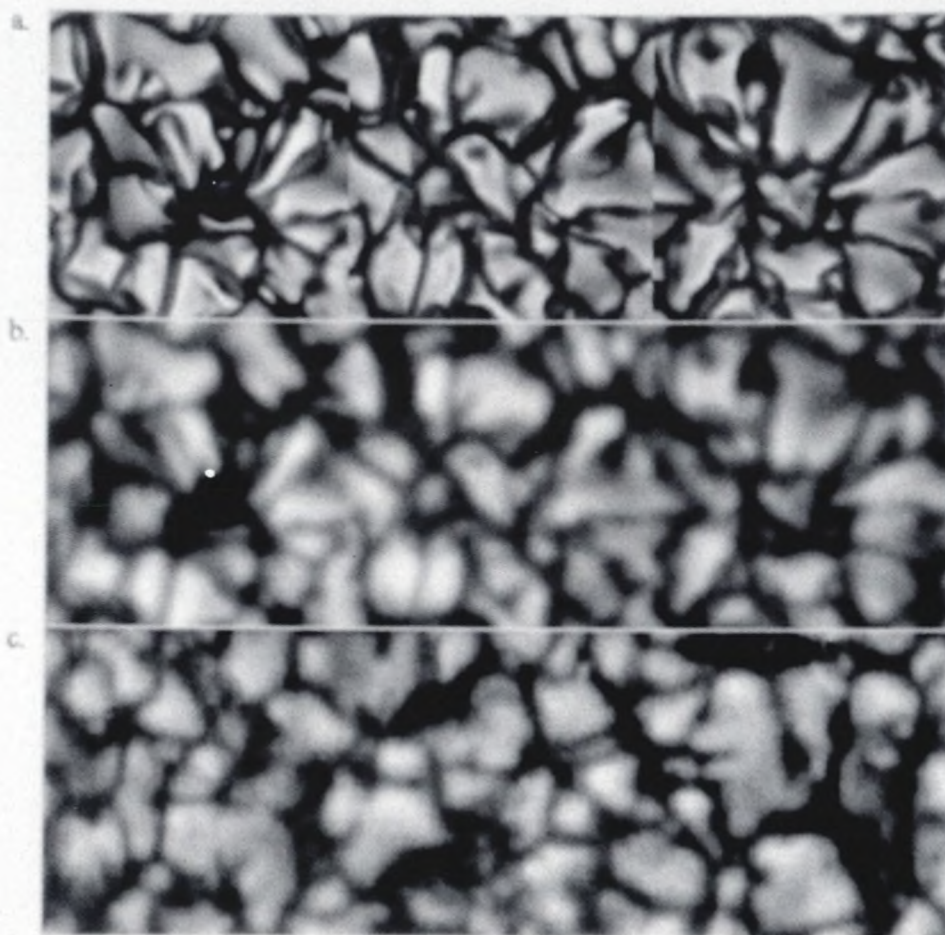
tioner af astrofysiske systemer fra jordens nærmeste omgivelse (magnetosfæren), til stjerner (som f.eks. solen), det interstellare rum, og galakser og galaksekerner, viser komplicerede strukturer i rum og tid.



Figur 1. Blokdigram, der viser sammenhængen mellem energiformer (blok), omdannelsesprocesser og energitransport (kursivt) mellem solens forskellige lag (fed skrift). Diagrammet er skematisk, og viser f.eks. ikke realistiske forhold mellem de forskellige energiformer.

Væsentlige årsager hertil er, at den gas som de fleste astrofysiske systemer er opbygget af, er elektrisk ledende og desuden meget turbulent; d.v.s., at udglattende processer først kan gøre sig gældende på en meget lille skala. En konsekvens af at gassen er elektrisk ledende er, at der der spontant kan dannes magnetfelter. Gassens tilstand karakteriseres derfor ikke kun af hastighed, tæthed og temperatur, men også af magnetiske og elektriske felter. Muligheden for at udføre numeriske simuleringer er afgørende for vores forståelse af sådanne systemer. De numeriske resultater erstatter her de manglende muligheder for detaljerede observationer; vi kan ikke “kikke ind” i en stjernes indre, og vi lever ikke længe nok til at studere en galakses dynamiske udvikling.

Hvordan ville det være at prøve på at forstå Jordens vejrsystem, alene ud fra oplysninger om jordens tyngdekraft og rotation, middeltemperatur, lufttryk ved overfladen, og luftens omtrentlige sammensætning? Med



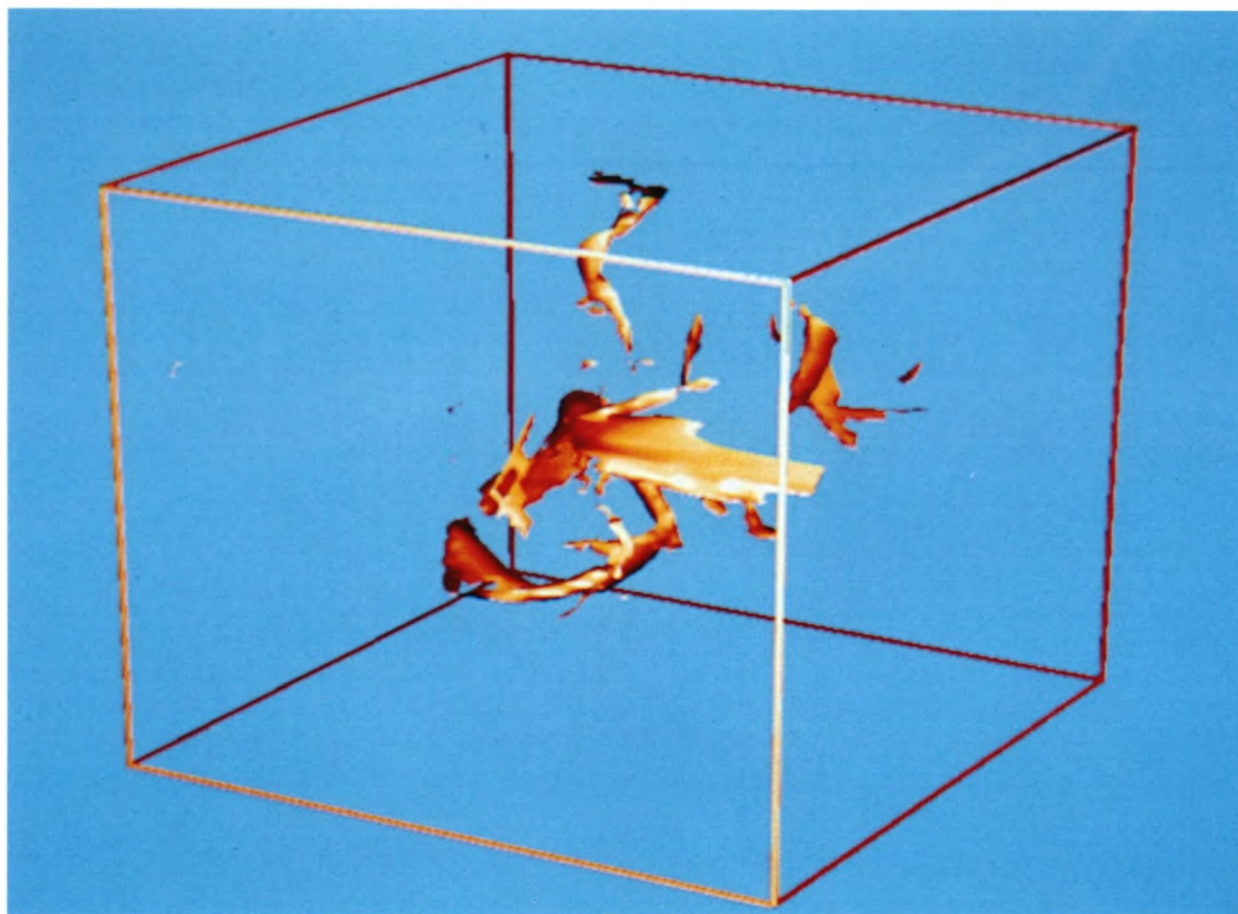
Figur 2. En sammenligning af syntetiske billeder fra en supercomputersimulering med et billede af solens overflade fra det svenske solobservatorium på La Palma. **a.** Tre syntetiske billeder fra en 3D simulering med opløsning $125 \times 125 \times 105$ er lagt ved siden af hinanden, for at danne et billede svarende til et område af størrelse 18.000×6.000 km. De syntetiske billeder viser lysintensitet på modellens overflade ved en bølgelængde af 6300 Ångström. **b.** viser de samme tre syntetiske billeder, med udglattende effekter svarende til teleskopets størrelse og lufturo i jordens atmosfære. Herved udglattes også overgangen mellem de tre delbilleder, som herefter kan sammenlignes med det observerede billede (**c**).

udgangspunkt i disse ting kan man kun komme frem til nogle ganske generelle slutninger om jordens atmosfære; dens trykskalahoje, omtrentlige temperaturfordeling, og (hvis man var i besiddelse af et skarpt intellekt og tilstrækkelig tid), noget om den overordnede luftcirkulation.

Med udgangspunkt i detaljerede vejr- og klima-observationer har man en langt bedre chance for at forstå jordens vejrsystem og klima. Med "observationer" af strukturer og udviklingsforløb fra detaljerede computersimuleringer har man ligeledes en langt bedre chance for at forstå komplicerede astrofysiske plasmafænomener. Og ligesom vejrkort og animationer af satellitobservationer hjælper gevaldigt når vejret skal forklares, så er billeder og videoanimationer fra supercomputersimuleringer en stor hjælp, når astrofysiske plasmafænomener skal forklares for ikke-eksperter.

Med computersimuleringer kan man skabe et syntetisk observations- og illustrationsmateriale, der faktisk ofte har større præcision og detaljerigdom end man normalt kan regne med fra observationer. Begrænsningen ligger i den *faktiske* detaljerigdom, som er langt større i virkeligheden, selv om mulighederne for at registrere disse detaljer kan begrænse *observationernes* detaljerigdom. Computersimuleringer kan observeres "eksakt", og på måder som ofte savner sidestykke indenfor f.eks. laboratorieeksperimenter eller astronomiske observationer.

Det afgørende for om computersimuleringen kan bruges til at forstå et fænomen er, om den numeriske detaljerigdom er stor nok til, at simuleringen indeholder kvalitativt rigtige strukturer og forløb. Virkelighedens strukturer har langt flere detaljer, men for både virkeligheden og simuleringen gælder, at de små detaljer alligevel ikke er de samme i forskellige observationsserier. Lav-



Figur 3. En visualisering af magnetfeltet i en simulering af dynamoeffekt i en konvektionszone med rotation. Billedet viser den del af rummet, hvor magnetfeltet er større end 50% af dets maksimumsværdi.

og høj-tryk, varm- og kold-fronter, jetstrømme og andre fænomener forekommer på ethvert vejrkort, men aldrig i eksakt det samme mønster. Computersimuleringer fungerer i denne sammenhæng ligesom observationsserier fra virkeligheden; ingen simulering ligner en anden i de små detaljer, men de samme kvalitative fænomener kommer igen i næsten ethvert eksperiment.

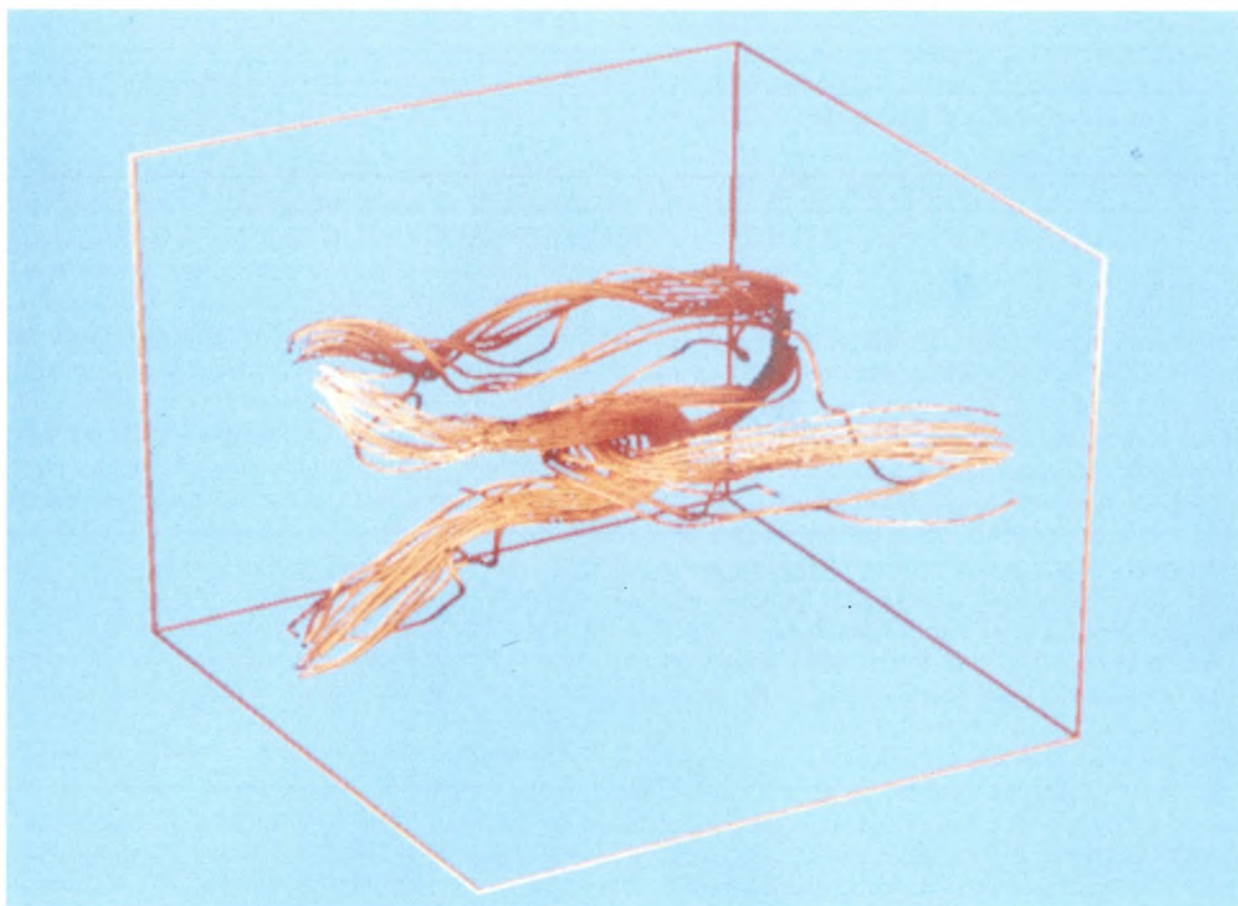
Solen som astrofysisk plasmalaboratorium

Af flere årsager er solen et højst interessant objekt for studier af astrofysiske plasmafænomener. Dens afstand er lille nok til, at vi kan se detaljer på dens overflade. Disse detaljer er af en passende størrelse, sådan at de karakteristiske tidsskalaer er sekunder, minutter, timer, dage, eller måneder. Gastætheden er høj nok til (i hvert fald under overfladen og tæt ved overfladen), at man kan bruge en *kontinuumsmodel*; det er ikke nødvendigt at arbejde med en partikelbeskrivelse af gassen. Der forekommer et væld af interessante plasmafænomener; de fleste betinget af forekomsten af en zone med turbulent konvektion (varmestrømning) og et kompliceret magnetfelt. Nogle af disse fænomener har desuden en mærkbar, til tider endog dramatisk, indflydelse på jordiske forhold.

Indirekte evidens viser, at andre stjerner er ligeså komplicerede. De fleste andre astrofysiske systemer karakteriseres også af turbulens og magnetfelter. Her er vores muligheder for observation af detaljer i rum og tid dog ikke nær så gode, og solen indtager derfor en særstilling som "prototype"; et astrofysisk plasmalaboratorium med stadigt pågående, spontane eksperimenter.

Figur 1 viser i et blokdiagram nogle af de vigtigste fænomener på energiens vej fra solens indre ud til solens overflade, og videre ud i rummet, hvor jorden påvirkes af de forskellige former for energi som solen udsender.

Energien dannes ved termionukleare processer i solens kerne, og siver ved strålingsdiffusion langsomt ud mod solens *konvektionszone*, der omfatter de yderste 30% af solens radius. Her foregår varmetransporten ved materialebevægelse; varm gas stiger, i løbet af nogle uger, op til solens overflade, hvor den afkøles og atter synker ned mod konvektionszonens bund. Kombinationen af den turbulens, som dannes i konvektionszonen, og solens rotation (et levn fra solens fødsel udfra en roterende skive af gas) danner forudsætninger for en *dynamo proces*, hvor der spontant dannes et magnetfelt. Det måske mest kendte tegn på tilstedeværelsen af et magnetfelt er *solpletterne*,



Figur 4. En visualisering af udvalgte feltlinier fra en simulering (opløsning 88^3) af et plasma med feltlinier forankrede i væggene til højre og venstre i billedet. Feltet er periodisk i de andre to retninger.

relativt små mørke områder hvor magnetfeltet er stærkt nok til at undertrykke den normale energitransport, og som derfor er mørkere (koldere). Andre observationer (f.eks. i røntgenområdet) viser, at der er magnetfelter tilstede over hele solen, og at magnetfeltets fortegn og intensitet forandres med en periode på ca. 22 år. Under solens overflade er den magnetiske energi lille i forhold til gassens energi, men ovenover solens overflade dominerer den magnetiske energi. Magnetfeltet deformeres hele tiden af de materielle bevægelser, som derved overfører mekanisk energi til magnetisk energi.

I dette system kan ligevægt kun opretholdes hvis magnetisk energi atter transformeres til kinetisk og/eller termisk energi. Dette sker i form af en fordeling af magnetiske udladninger; nogle få og sjældne med meget høj energi, andre og langt flere med lav energi og på en lille skala. Det viser sig empirisk, at fordelingen af magnetisk energiuudladning følger en enkel (potens-) lov. En konsekvens af disse udladninger er, at nogle af de ladede partikler accelereres til meget høje energier. En del af de accelererede partikler bremses og energien omdannes til røntgenstråling, hvorimod andre når ud i solvinden, hvor endnu en lille del rammer jordens magnetosfære.

“Solvinden” består af en meget tynd gas med meget høj hastighed (op til flere hundrede kilometer per sekund). Gassen accelereres dels af den stærke varme (nogle millioner grader) i solens korona, dels direkte af magnetisk-hydrodynamiske processer. Solvinden rammer jordens *magnetosfære*, et område, som domineres af jordens magnetfelt, og som danner en beskyttende “kokon” om Jorden. I polarområdet er denne kokon åben, og grænselaget mellem solvinden og magnetosfæren kobler direkte ned til jordatmosfærens øvre lag (ionosfæren), hvilket bl.a. fører til dannelsen af nordlys.

Variationer i det magnetiske aktivitetsniveau på solen fører til forandringer i balancen mellem solvinden og magnetosfæren. Kraftige udbrud på solen fører til *magnetiske storme* i jordens magnetosfære, som kan have ret dramatiske effekter. I 1989 var der en kraftig magnetisk storm, under hvilken nordlys kunne ses helt ned til 40. breddegrad. Den medførte voldsomme forstyrrelser i radiokommunikation, og magnetisk induktion i kraftledninger, som bl.a. medførte strømsvigt for 6 millioner canadiere i 9 timer. Til trods for at kun en meget lille del af solens stråling udsendes som andet end varme, kan man altså på jorden registrere tydelige spor af solens magnetiske

aktivitet. Der er også en endnu ikke forstået forbindelse til jordens klima, hvor visse indikatorer tydeligt viser den ovennævnte 22 års periode. Man har i Australien fundet gamle sedimenter, som viser at solen har haft en lignende opførsel, med stort set samme periode i meget lang tid.

Den slags potenslove, som altså bl.a. karakteriserer energiudladninger i solens magnetfelt, har vist sig at være typiske for mange kaotiske fænomener i naturen. Fordelingen af jordskælvs størrelse, fordelingen af skred i de små sandbunker man leger med i laboratorier for at lære noget om kaos, ja sågar visse af det økonomiske markeds indikatorer viser sig at følge sådanne potenslove. Vi taler her om fordelinger over tid, men det viser sig også, at f.eks. fordelingen af magnetfelt over solens overflade følger lignende love, og at dette tyder på at magnetfeltet er *fraktalt*; d.v.s., at de samme slags magnetfeltsmønstre går igen på skalaer fra de største, til de mindste. Denne fraktale fordeling skyldes sandsynligvis, at magnetfeltet hele tiden deformeres af den turbulente konvektion i solens konvektionszone. Ved hjælp af supercomputersimuleringer forstår man nu kvalitativt de faktorer, som kontrollerer denne turbulente konvektion (Stein & Nordlund 1989; Spruit, Nordlund & Tittle 1990). En af de vigtigste er den meget store forskel mellem gastætheden ved solens overflade, hvor al afkøling foregår, og gastætheden i det indre af solen, hvor den fra overfladen afkølede gas nødvendigvis udgør en meget lille brøkdel. Den lave temperatur ved overfladen medfører, at gastætheden her aftager meget hurtigt med højden. Det fører til, at den opadstigende, varme gas ekspanderer hurtigt og at det meste af den til enhver tid opadstigende gas aldrig når at stige længere end ca. én tæthedsskalahøjde. Den typiske skala for bevægelsen er derfor, på enhver dybde, nogle få skalahøjder (også horisontalt). Figur 2 viser observationer og simuleringer af turbulente konvektionsceller ved solens overflade. Disse celler er fra nogle få hundrede til nogle få tusinde kilometer store. De dybere liggende celler er større, og der eksisterer derfor et hierarki af konvektive skalaer, som er i stand til at deformere det magnetfelt, som også er til stede i konvektionszonen.

Dette er et godt eksempel på forholdet mellem virkelighed, observationer og simulationer. Som der ses af Figur 2 er den numeriske detaljerighed større end den observerede, selv om det her drejer sig om observationer fra et excellent instrument, med avanceret elektronik til udvælgelse af de bedste af tusinder af billeder med varierende indflydelse fra lufturo. Omvendt er virkelighedens detaljerighed langt større end den numeriske; den turbulente struktur fortsætter ned til en skala, der sandsynligvis er ca. een million gange mindre end figurens.

Det er måske værd at påpege, at solens tilsyneladende jævnt lysende overflade faktisk består af et cellemønster hvor de lyse områder er ca. dobbelt så lyse som de mørke. Supercomputersimuleringerne viser også, at dette cellemønster er et meget tyndt overfladefænomen, og at der under overfladen dannes tynde, kolde og kraftigt roterende filamentter; en slags "op og ned-vendte tornadoer".

Ved hjælp af supercomputersimuleringer er vi nu også

i stand til at studere denne vekselvirkning mellem magnetfelt og turbulent konvektion, og kan prøve at forstå de *dynamomekanismer* som skaber og forstærker magnetfeltet (Nordlund et al. 1992). Figur 3 viser en 3D visualisering af magnetfeltet i en model af en turbulent konvektionszone. Da man ved, at stjerners rotation er helt afgørende for niveauet af magnetisk aktivitet, er modellen konstrueret med et roterende koordinatsystem, hvilket medfører at den konvektive bevægelse får en roterende komponent. Man kan i figuren se, at dette fører til dannelsen af spiralformede magnetfeldtsstrukturer. Disse dannes rundt omkring filamentter af roterende, kold gas fra overfladen. Dynamoeffekten opstår, fordi den kolde gas er i stand til at transportere magnetfeltet ned mod bunden af konvektionszonen, til trods for at et magnetfelt har en naturlig tendens til at flyde op til overfladen. Den roterende bevægelse bevirker, at magnetfeltet foldes sammen til gradvist kraftigere magnetfeldtsstrukturer, indtil de magnetiske kræfter er i stand til at bremse udviklingen.

Ved hjælp af supercomputersimuleringer prøver vi også at forstå, hvordan udviklingen i det af magnetisk energi dominerede område ovenover overfladen (koronaen) kan føre til de tidligere omtalte kraftige magnetiske udladninger. Feltlinier i koronaen er forankret i den turbulente konvektionszone. Vores hypotese er, at dette medfører en mekanisk deformation af magnetfeltet, som igen medfører en fraktal, overkritisk fordeling af fri magnetisk energi i koronaen (Nordlund & Galsgaard 1992). Vi er nu ifærd med, bl.a. ved hjælp af den nye massivt parallelle supercomputer CM-200 ved UNI•C i Lyngby, at opbygge computermodeller med tilstrækkelig numerisk opløsning til at kunne afprøve denne hypotese.

Figur 4 viser en 3D visualisering af magnetfeltet fra et af CM-200 eksperimenterne. Vektorfeltet er her vist ved at visualisere udvalgte feltlinier i tre dimensioner, hvor dybdefornebbelsen fremkommer ved hjælp af en syntetisk belysningseffekt. Indtrykket svarer nogenlunde til en effekten af en diffus lyskilde placeret ved siden af betragteren, hvor større afstand fører til mørkere objekter, og hvor der ikke dannes skygger.

Man ser i midten af billedet, hvordan bundter af feltlinier, forankrede i henholdsvis venstre og højre "væg", er flettede om hinanden. Denne "knude" kan kun skæres over ved at magnetisk energi ødelægges, og energien i stedet for omdannes til termisk eller kinetisk (bevægelses-) energi.

Figuren er et godt eksempel på, at man fra supercomputersimuleringer kan lave "observationer" af en ny type. Det ville ikke være muligt fra laboratorieeksperimenter direkte, at lave denne slags figur; heller ikke at måle magnetfelt eller hastighedsfelt i tre dimensioner så nøjagtigt, at man kunne fremstille figuren fra observerede data. Da den tidlige udvikling af såvel hastighedsfelt som magnetfelt hænger intimt sammen med systemets *topologi*, d.v.s., med hvordan feltlinierne binder forskellige områder af rummet sammen, er visualisering afgørende for forståelsen af de dynamiske sammenhænge.

Referencer:

- 1) "Topology of Convection Beneath the Solar Surface", Stein R.F., Nordlund, Å., *Astrophys. J.* **342**, L95-L98 (1989)
- 2) "Solar Convection", Spruit, H.C., Nordlund, Å., Title, A., *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **28**, 263-302 (1990)
- 3) "Dynamo Action in Stratified Convection with Overshoot", Nordlund, Å., Brandenburg, A., Jennings, R.L., Rieutord, M., Roukolainen, J., Stein, R.F., Touminen, I., *Astrophys. J.* **392**, 647-652 (1992)
- 4) Nordlund, Å., Galsgaard, K., "Large Scale Simulations", *American Institute of Physics Conference Proceedings*, **267**, 13-23, (1992)

Åke Nordlund er lektor ved Astronomisk Observatorium, NBI. Han er filosofie doktor i teoretisk fysik fra Stockholms Universitet, og kom til Danmark som NORDITA stipendiat i 1975. Han har været "visiting scientist" ved en lang række amerikanske observatorier. Hans hovedinteresse er forskellige aspekter af struktur og kaos indenfor astrofysik.

Sorødagene 1993

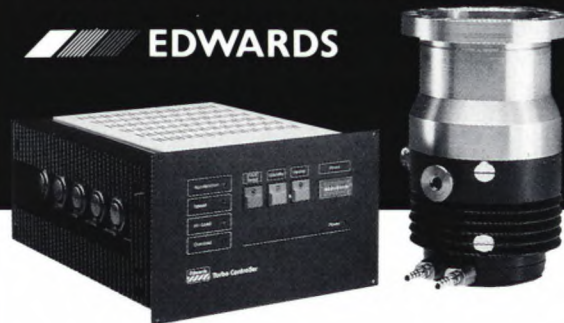
Nils O. Andersen.

Takket være imødekommenhed fra fysikinstitutterne i Aarhus, Odense og København, er det lykkedes at skabe økonomisk grundlag for fortsat afholdelse af fysik sommerkurserne i serien af tilbud, der indledtes i 1988 i et samarbejde mellem Dansk Fysisk Selskab og Fysiklærerforeningen. I lighed med tidligere afholdes kurset på Sorø Akademi i den første uge af skoleferien. I år i dagene 20.-28 juni. Deltagerantallet begrænses til 24 og tilbuddet gælder alle elever, som til sommer afslutter 2.g. Sommerens to hovedemner bliver "Astronomi og kosmologi" og "Vejr og klima", som suppleres med aktuelle indslag indenfor områderne astronomi fysik og geofysik. Tilmeldingsfristen er 1. maj og prisen 950 kr. Et mindre antal fripladser er til rådighed. Foldere med indbydelse og tilmeldingsblanketter udsendes omkring påske til alle gymnasier via fysiklærerforeningens kontaktpersoner. De kan også bestilles ved at skrive til Dansk Fysisk Selskab, c/o NBI, Ørsted laboratoriet, Universitetsparken 5, 2100 Kbh. Ø, eller på telefon 35 32 04 69, eller 35 32 04 00.

Edwards High Vacuum Turbomolekularpumper

- ★ 4 basistyper
- ★ High Power DC-motor
- ★ 40 flangevarianter
- ★ Ny EXT E økonomiversion
- ★ 17 modeller
- ★ Lavt støj- og vibrationsniveau

EDWARDS



Edwards High Vacuum er en af verdens førende producenter af vakuumpumper og -udstyr. Den nye EXT E version gør det nu muligt at anskaffe en Turbomolekular Vakuumpumpe til en fornuftig pris. Kan køles enten med luft eller vand, og kan styres af den normale EXC350 og EXC500 Turbo-kontroller. Edwards High Vacuum er også Dry Pumps, Diff. Pumps, Vakuüm måleinstrumenter, Frysetøringsanlæg og Pådampningsanlæg.

Ring for yderligere oplysninger!

Marielundvej 36
2730 Herlev
42 91 75 11

Buch & Holm A/S

Meddelelser fra Dansk Fysisk Selskab

Resultat af suppleringsvalg til bestyrelsen og konstituering:

Da Brian Bech Nielsen og Jens Peter Lynov er udtrådt af DFSs bestyrelse, blev der afholdt suppleringsvalg for resten af indeværende valgperiode, dvs. indtil udgangen af 1993. Bestyrelsen foreslog Jakob Bohr (Risø) og Allan H. Sørensen (Århus Universitet). Der fremkom ingen yderligere forslag fra medlemmerne, hvorfor de to nævnte er valgt. Ved bestyrelsesmødet den 8. marts vedtog bestyrelsen at konstituere sig med Jakob Bohr som formand, Nils O. Andersen som næstformand såfremt der kan findes en passende sekretær i omegnen af RISØ. Allan H. Sørensen konstitueredes som kasserer.

DFS forårsmøde 16. – 18. maj 1993

Selv om tilmeldingsfristen til forårsmødet er overskredet, er der dog stadig ledige pladser på Lalandia: 1400 kr. for eget hus, 1000 kr. for eget værelse og 800 kr. for egen seng, inklusive måltider fra mandag morgen til tirsdag eftermiddag. Mødeafgiften er 500 kr. Se nærmere detaljer på midtersiderne i KVANT 92-4. Ingen dansk fysiker bør forpasse denne årets chance for at se spændende foredrag og plakater om de nyeste landvindinger, deltage i DFSs generalforsamling og overvære overrækkelsen af NKTs forskerpris i fysik. Henvendelse til Bjarne Andresen, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet, Universitetsparken 5, 2100 København Ø, tlf. 3532 0470, fax 3532 0460, e-post kufba @ vm.uni-c.dk.

Adresseændringer

Vi får desværre en del blade retur, fordi modtageren er flyttet uden at have givet det lokale postkontor besked om, at man modtager det postbesørgede blad KVANT. Ligeledes modtager mange fysikinstitutioner blade til studenter, der forlængst har forladt stedet. Husk derfor at melde adresseændring: inden for Norden: Til det lokale postkontor uden for Norden: Til Lene Körner, Matematisk Institut, Universitetsparken 5, 2100 København Ø Følges denne simple anvisning, bliver også KVANTs, DFSs og SNUs medlemsregistre automatisk opdateret.

Kontingentopkrævning til DFS for 1993

Som et forsøg udsendes girokort for 1993-kontingentet til DFS i år separat af Avispostkontoret til DFSs medlemmer ultimo april. Kontingentet er uændret 325 kr. for ordinære medlemmer, firmaer, institutter, skoler, m. v. og 75 kr. for studenter og pensionister. Heri indgår et kollektivt medlemskab af European Physical Society samt abonnement på KVANT. Individuelt ordinært medlemskab af EPS, hvorved man modtager bladet Europhysics News, koster yderligere 220 kr. Ved studenter forstås i denne forbindelse alle under kandidatniveau, altså ikke Ph. D.-studerende, som formodes at have en væsentlig bedre indtjening. På generalforsamlingen i november 1992 blev bestyrelsen opfordret til at oprette en fond til støtte af fysikken i Østeuropa. Dette kunne være i form af et doneret abonnement på et eller flere fysiske tidsskrifter, støtte til østeuropæiske fysikers deltagelse i møder i vesten, et korterevarende gæsteophold el. lign. DFS har nu etableret en sådan fond og opfordrer alle medlemmer til at give et frivilligt bidrag efter eget valg. Beløbet lægges blot til årskontingentet. Yderligere deltager DFS i efteråret i en workshop på Nordita sammen med de andre nordiske fysiske selskaber, de baltiske fysiske selskaber, European Physical Society og American Physical Society med henblik på at støtte fysikken i de baltiske lande. KVANTs læsere vil blive informeret om mødets udfald.

Girokort udskrevet af Avispostkontoret kan desværre ikke indeholde så megen tekst, som vi er vant til, så indbetaleren bedes selv på girokortets bagside angive sin type af medlemskab, sektionstilhør, størrelse på evt. frivilligt bidrag til DFSs Østeuropafond, og CPR-nummer. Det sidste er af hensyn til, at vi vil søge at få DFS registreret hos Told&Skat, så medlemmerne automatisk får skattefradrag for det indbetalte; en sådan registrering sker via CPR-nummer. For en ordens skyld gøres opmærksom på, at ovenstående selvfølgelig ikke berører abonnenter, som modtager KVANT via Selskabet til Naturlærens Udbredelse eller ved individuelt abonnement direkte hos KVANT.

Abonnement på KVANT

koster 135 kr for en årgang og vil blive opkrævet pr. giro. Nye abonnenter vil modtage eventuelle tidligere numre af den løbende årgang. Medlemmer af Dansk Fysisk Selskab og Selskabet for Naturlærens Udbredelse vil modtage bladet som et medlemsblad.

Abonnement tegnes ved at skrive til

Lene Körner, Matematisk Institut, Universitetsparken 5, 2100 København Ø