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.

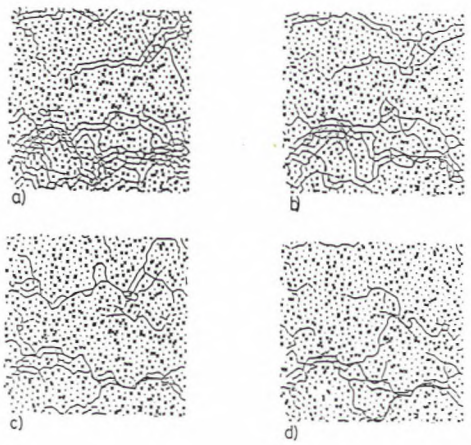
Mit kendskab til computere begrænsede sig i 1986 til et par beregninger af nogle hidsige integraler, som jeg ikke havde kunnet reducere helt tilbunds i hånden. Alt mit tidligere arbejde havde begrænset sig til analystiske (d.v.s. håndregning) undersøgelser af de fysiske systemer, jeg havde kigget på . 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 gitre 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 supraledereres 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 elastisk gitter reagere på baggrundspotentialet. Matematikken anvendt i disse beregninger er ikke specielt vanskelig, men aligevel 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 potentialet, 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.

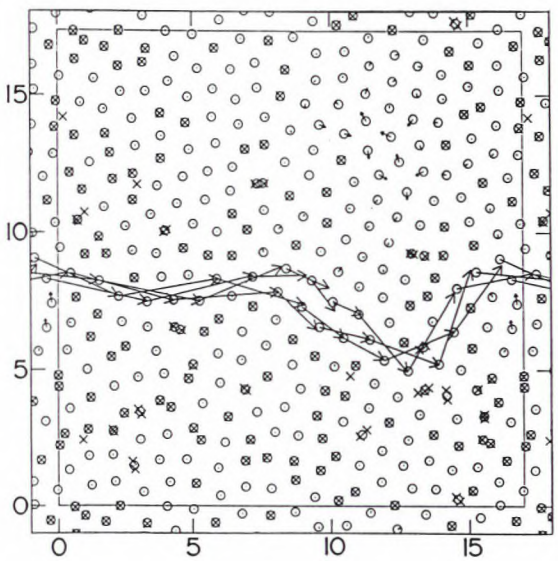
På computeren kan vi lave alle de *gedanken*eksperimenter vi har fantasi til at udtænke. Vi bestemmer selv præcis, hvilke kræfter vi ønsker at inkludere. Effekter, som ikke lader sig adskille i rigtige eksperimenter, kan studeres enkeltvis for senere at blive adderet sammem. Alt kan lade sig simulere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

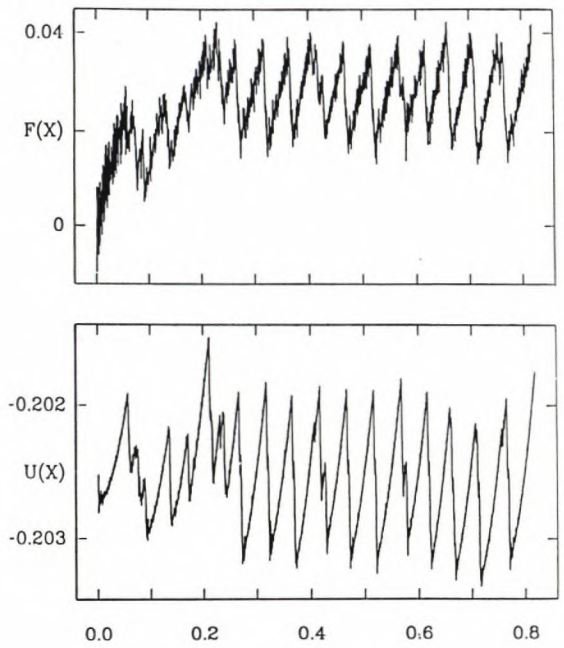
Der er ikke noget som helst helligt i denne opdeling af problemet. Den kommer simpelt hen af, at maskinerne kun havde en enkelt processor, som tog sig af alle beregninger. Vektorprocessorer og parallelprocessorer har mange regneenheder som arbejder side om side. Nu drejer det sig om at strukturere sit 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 parallelprocesorer 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 betræbelser på optimering. Man kommer langt med et program i almindelig standard FORTRAN, som er stuktureret 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 parallelprocesorer 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.

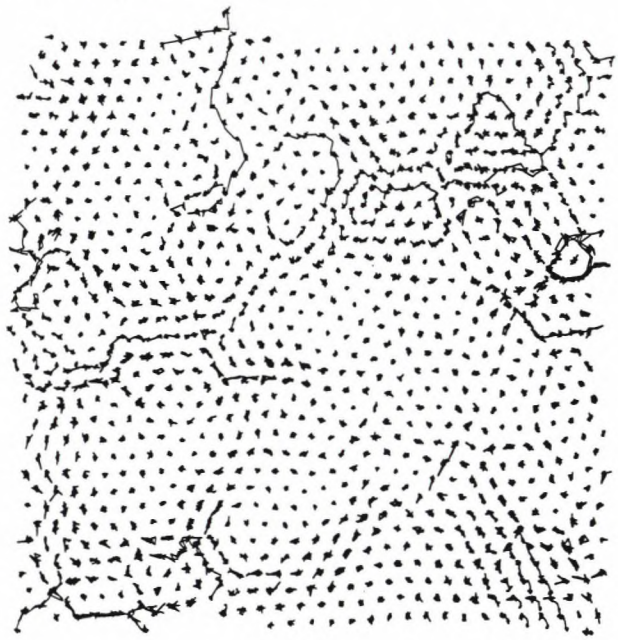


Figur 4. Variationerne i den totale kraft, F(X), og den totale energi, U(X), for systemet vist i fig. 2. Den vandrette akse angiver positionen af partiklernes massemidtpunkt.

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 massemidtpunkt 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 potentialet 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 massemidtpunkt. 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 supraledereres 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: supraledereres magnetiske egenskaber, friktion, sandbunker og lignende.