

**Co se stane při srážce černých děr? Není-li možné provést pokus, sahají vědci k počítačové simulaci. Dosud nepřekonatelné hranice padají a otevírají se nové oblasti vědění. Užitek z toho však mají i předměty denní potřeby.**

## Cesty do neznáma

“Bez počítačové simulace bychom nikdy nedokázali zkonstruovat inkoustovou tiskárnu,” přiznává Ross R. Allen, vedoucí projektu a nestor výzkumníků z laboratoří společnosti Hewlett-Packard v Palo Alto. Na otázku, zda by tentýž úkol nesplnily prototypy, zamítavě kroutí hlavou: “To se ukázalo jako nemožné. Pro konstrukci nové tiskové techniky chyběly technikům základní vědomosti.”

Už v letech 1981 až 1983 pracoval chemik Ross R. Allen na softwaru, který simuluje maličké inkoustové kapky. Chtěl zjistit, co se stane, když kapalina vystřikuje z trysky a dostává se do styku se vzduchem, a jaké síly působí na kapku po dopadu na papír. Simulační software psal pro tehdejší vysoce výkonný počítač Vax.

Celý týden se stroj potýkal s 10 000 řádky fortranského programu. Nakonec počítač opravdu znázornil, co se v rozhodujících 100 mikrosekundách s kapkou inkoustu stane. Teprve pak, když vědci odvodili optimální tvar inkoustové patrony a trysky, mohli technici tiskárnu sestavit.

Allen pro tuto simulaci vytvořil komplexní programový systém, do něhož zahrnul veškeré poznatky moderní fyziky o vlastnostech kapalin. Výsledek činnosti počítačového programu tehdy fascinoval dokonce i autora samého. To, jak se kapka inkoustu v dané situaci zachová a jaký tvar zaujme, dosud nikdo z vědců nevěděl.

### Přeměna křemíku na kov

Předpoklady pro prakticky použitelnou počítačovou simulaci vytvářejí vědci za pomoci modelů, které během mnohaleté práce stále vylepšují. To, co se podařilo Dr. Allenovi v 80. letech s inkoustovou kapkou, dokázal profesor Michele Parrinello v případě křemíku.

Tento sicilský rodák vyvinul společně se svým kolegou Robertem Carem na univerzitě v Terstu počítačovou simulaci atomů. Z tohoto úkolu se nakonec stalo jeho celoživotní dílo a program pod označením “Car-Parrinello Molecular Dynamics” se rozšířil nejenom na univerzitách a ve výzkumných centrech. Parrinello dnes pracuje ve stuttgartském Institutu Maxe Plancka pro výzkum pevných látek, kde společně se svým týmem už 15 let zdokonaluje systém na stále nových úlohách. Jeho kolega Car dnes pracuje v Ženevě, mnoho dalších vědců software používá a přispívá k jeho dalšímu rozvoji.

Parrinello se zprvu zabýval křemíkem. Při extrémním zahřátí se tento prvek mění ve vodivý kov. Tento poznatek, užitečný pro vývoj počítačových čipů, získali Car a Parrinello na základě počítačové

simulace jednotlivých atomů. Jeho software od té doby využívají vědci v chemických výzkumných ústavech a v průmyslu, jako třeba ve firmách BASF nebo Hoechst, i pro jiné látky.

Jestliže chcete například vyrábět polymery, tedy umělé hmoty, je třeba vytvářet dlouhé molekulové řetězce. Bez podpůrných látek, takzvaných katalyzátorů, je těžké přimět polymery k tomu, aby tvořily stabilní sloučeniny. Na počítači lze látky i vliv teploty a dalších vnějších faktorů libovolně kombinovat. Lze tak získat představu o vhodném složení materiálu mnohem rychleji, než by to bylo možné pomocí laboratorních pokusů.

Nejnovější parádní kousek se však Parrinellovi podařil při simulaci v oblasti astrofyziky. V počítači (Cray T3E) "zahřál" vodu na teplotu 6000 °K a vystavil ji přitom tlaku milionkrát většímu, než je atmosférický tlak na Zemi. Příčinou toho, že se tímto nijak vlažným "vývarem" zabýval, byla skutečnost, že satelity naměřily na planetě Uran oscilace, které dokazují přítomnost vody uvnitř planety. V nitru takového tělesa ale působí extrémní teploty a tlak. Parrinello dokázal svou simulací výsledky měření satelitu vysvětlit.

### **Kov vznikne i z vody...**

Právě výsledky takových simulací posouvají výzkum vesmíru vpřed. Například záhadné hodnoty magnetického pole planety Neptun se dají vysvětlit pouze tak, že se uvnitř planety nachází kapalina, která je vynikajícím vodičem. Je snad možné, že se voda za tak extrémních podmínek dostává do tohoto neobvyklého stavu?

Když superpočítač v Institutu Maxe Plancka ve Stuttgartu po týdnu výpočtů odevzdal výsledky, bylo překvapení ve vědeckých kruzích dokonalé: při vysoké teplotě a vysokém tlaku se voda přemění v kov s magnetickými vlastnostmi. Po vydařeném experimentu si Parrinello dokonce dal vyrobit odpovídající model molekuly a často jej hrdě prezentoval. Atomy vytvářející nová spojení mění molekulu vody, jak ji známe z vyučovacího předmětu chemie, ve zcela novou strukturu.

Michele Parrinello už přemýšlí o novém projektu – chtěl by se věnovat biologickým systémům. Nyní zkoumá pomocí simulace enzym pro boj proti viru HIV. Pokud uspěje, pomůže lidstvu oslabit hrůzu z AIDS.

### **Když se srazí černé díry...**

Počítačové simulace, zejména v astrofyzice, potřebují obrovský výpočetní výkon. Dr. Ed Seidl pracuje v Institutu Maxe Plancka pro gravitační fyziku v rámci Institutu Alberta Einsteina v Postupimi na simulaci černých děr. Přitom už nevystačí s počítačem SGI, který je v ústavu k dispozici. Takový výzkum se daří teprve s přispěním superpočítačů amerického NCSA (National Center for Supercomputing Applications) v Illinois, centra Konrada Zuse v Berlíně a počítačů výpočetního střediska v Garchingu. Tyto počítače spolu komunikují přes výkonnou síť rychlostí 10 megabitů za sekundu a výpočty koordinuje software s názvem "Cactus Computational Toolkit", vyvinutý Seidelovou pracovní skupinou. Řešením složitých soustav diferenciálních rovnic se tak vědci přibližují po krůčcích představám o vlastnostech vesmíru.

Pro mezinárodní spolupráci má Seidel závažný důvod: "Problémy, které řešíme, jsou tak rozsáhlé a vyžadují tolik znalostí expertů z nejrůznějších oborů, že úspěch je možný jen s využitím sítě spolupracujících ústavů."

Vědci jsou nyní na stopě takzvaným gravitačním vlnám, které Albert Einstein předpověděl ve své obecné teorii relativity. Zatím se ještě nikomu nepodařilo takové deformace fyzikálního prostoru dokázat. V Německu, USA a v Itálii se však už stavějí detektory, které by měly tyto vlny vystopovat.

Také na hannoverské univerzitě pracují vědci společně s Institutem Alberta Einsteina a s univerzitou v Glasgowě na projektu GEO600, který má měřit gravitační vlny. Výsledky simulací z Postupimi pak mají posloužit ke správné interpretaci budoucích měření.

Počítačové simulace nabízejí podstatnou výhodu: vědci mohou libovolně měnit parametry a sledovat účinek na celý systém. Ať již pracují na simulaci inkoustové tiskárny, nebo na simulaci černých děr, počítačové modely vždy vysvětlují chování komplexního systému.

Avšak reálné experimenty tím nedosloužily. Ed Seidel k tomu říká: "Bez pokusů člověk snadno ztratí orientaci a výsledky simulací ho mohou zavést špatným směrem." Problémem je často skutečnost, že extrémní teploty a tlaky působí ve skutečnosti pouze po zlomky sekund, například při vznícení jaderné nálože. Výsledky vojenského výzkumu jsou přitom civilním vědcům k dispozici jen zřídka. Vzhledem k tomu, že výkonnost počítačů rychle roste, získá simulace v budoucnosti jistě ještě lepší pozici, než jakou zaujímá dnes. Výuka na univerzitách se tomu už přizpůsobuje. Ross Allen k tomu poznamenává: "Dnes už nevychováme chemiky, ale počítačové inženýry."

## **Dnes výzkum, zítra běžný život**

Počítači podporované snažení vědců má větší význam pro běžný život, než si umíme představit. Na základě simulací materiálů vznikají nejen umělé hmoty.

Ve farmaceutickém výzkumu modelují vědci vliv léků na organismus. Ve vývojových odděleních automobilky Ford se pomocí softwaru Roberta Cara a Michela Parrinella zkoumá povrch hliníku a možnosti dalšího vylepšení materiálu. Výrobce pneumatik Pirelli zase zjišťuje, které přísady v černé gumě zlepšují přilnavost pneumatik k vozovce. Výrobci kabelů hledají optimální materiály pro obaly vodičů. Seznam pracovišť a podniků, které používají simulační software k optimalizaci materiálů a k návrhům nových výrobků, by byl velmi dlouhý. Jak důležitý je jeho program pro průmysl, samozřejmě ví Michele Parrinello velmi dobře: "I ta sebemenší vylepšení mají při výrobě velký význam."

*Harald Fette*

## **"Výzkum bez počítačové simulace je nemyslitelný."**

Odpovídá Michele Parrinello, ředitel stuttgartského Institutu Maxe Plancka (na obrázku s modelem klastrové molekuly v rukou).

**Chip:** *Jaké místo mají simulace ve vědě?*

**Parrinello:** Bez simulace by byl už dnes nemyslitelný hlavně výzkum v oblasti přírodních věd.

**Chip:** *Nahradí počítač vědecké myšlení?*

**Parrinello:** I nadále je potřebná vědecká intuice. Vědec musí rozeznat souvislosti a z možností, které počítače vypočítají, vybrat ty správné.

**Chip:** *Vaše simulace jsou sice fascinující – například jak se voda na planetě Uran mění v elektrovodivý kov – ale komu prakticky poslouží?*

**Parrinello:** To, co se na první pohled zdá velmi odtazižené, nám pomáhá v porozumění komplexním strukturám. Jen tak můžeme vývoj posunout kupředu.

### **Počítačová simulace pohání technický pokrok**

V osmdesátých letech se vědcům podařil průlom v oblasti počítačové simulace. Výkonnost počítačů a softwaru už dosáhla takové úrovně, že tyto metody mohly i u vysoce komplexních problémů dodat spolehlivé výsledky.

Jedním z příkladů je metoda Roberta Cara a Michela Parrinella, díky níž může chemický průmysl získávat důležité poznatky potřebné při výrobě umělých hmot. Také v automobilovém průmyslu se aerodynamické tunely a srážkové testy stále více nahrazují počítačovou simulací.

To, k čemu byly dříve zapotřebí velké počítače, lze dnes často zvládnout i na PC s Pentiem II. Ve velkých výzkumných centrech dosahují počítače výkonnosti i přes 500 gigaflops (miliard operací s pohyblivou desetinnou čárkou za sekundu). Pro srovnání: Pentium II na 400 MHz dosahuje asi 170 megaflops.

Simulace v astrofyzice, například kolize černých děr, zvládnou teprve sdružené síly několika superpočítačů. Institut Alberta Einsteina v Postupimi se proto spojil s výzkumnými ústavami v Berlíně, Washingtonu a v Illinois.