

45 år med computersimuleringer

Computersimuleringernes "grand old man" i Danmark, professor Søren Toxværd, er still going strong.

Af Jeppe Dyre, grundforskningscentret *Glas og Tid*, RUC

Søren Toxværd startede med computersimuleringer ved Københavns Universitet i 1970 med datidens primitive computer, og han har været med i branchen lige siden. Nu er han tilknyttet grundforskningscentret *Glas og Tid* på RUC.

JD: Du har lavet computersimuleringer i en menneskealder og er en af fagets internationale pionerer – hvad er egentligt formålet med sådanne simuleringer?

ST: Der er forskellige typer simuleringer – jeg arbejder med såkaldt "molecular dynamics", som løser Newtons bevægelsesligninger. Herved kan man opnå en grundlæggende indsigt, men også få udviklet bedre materialer. Eksempelvis laver man i dag computersimuleringer i medicinalindustrien for at designe ny medicin.

JD: Er det ikke bedre at lave rigtige eksperimenter?

ST: Metoderne supplerer hinanden. I eksperimenter ser man typisk den makroskopiske opførsel, og det er ofte vanskeligt at se, "hvad der foregår" på molekylniveau. Det er computersimuleringernes force, at her har man det fulde mikroskopiske billede.

JD: Fortæl om hvordan du kom i gang – hvordan startede det hele for dit vedkommende?

ST: Jeg blev interesseret i simuleringer allerede i 1966, men da var computere simpelthen for langsomme. Min første simulering her i landet blev lavet på RECKU's store Univac mainframe-computer en gang i starten af 1970'erne.

JD: Hvor store beregninger kunne man lave den gang?

ST: Tunge simuleringer blev udført om natten. I løbet af en nat kunne man følge 1000 partikler i et nanosekund, hvis man var meget omhyggelig med at optimere sit program. Samtidig skulle man være yderst tålmodig, fordi den mindste fejl gjorde, at man måtte lave hele simuleringen forfra, dvs. så gik der yderligere en nat...

JD: Hvad var holdningen til computersimuleringer i det brede videnskabelige samfund den gang?

ST (griner): De fleste forskere mente, man legede med computere, at det bare var at betragte som en slags computerspil. I stedet mente man, at computere skulle bruges til databehandling, dvs. til analyse af eksperimentelle data.

JD: Udviklingen inden for computer-power har jo været



Søren Toxværd.

helt fænomenal - hvad bringer fremtiden, tror du, inden for computersimuleringer?

ST: Hm – jeg har altid undervurderet udviklingen, så hvis det fortsætter, så kommer der meget. Rigtigt meget!

JD: Hvor går fronten for tiden inden for computersimuleringer?

ST: En af de senere års meget spændende udviklinger er, at man i stor stil benytter grafikkort med mange processorer (nu mere end 1000). Vi fik umiddelbart en speed up på en faktor 25, da vi ved Glas og Tid i 2008 gik i gang med at bruge GPU-processorer. To år senere lancerede vi den superhurtige GPU-kode til molecular dynamics (<http://rumd.org>), som frit kan benyttes af enhver. Et GPU-kort som kan lave et tusinde milliarder regnestykker i sekundet koster kun et par tusinde kr., det er da tankevækkende.

JD: Vil man en dag helt kunne undvære eksperimenter?

ST: Nej det kan man ikke. Også i fremtiden vil der være et samspil mellem computersimuleringer og eksperimenter, som man f.eks. ser det lige nu i opbygningen af den kæmpestore europæiske neutronspretnings-ressource i Lund, ESS, der indvies i 2019.

JD: Til slut, hvad vil du anbefale et ungt menneske med interesse for kemi eller fysik – skal han eller hun gå computervejen eller blive ved traditionelle laboratorieeksperimenter?

ST: Det helt afgørende er, at vælge det man er mest tiltrukket af. Når det er sagt, opfatter jeg den eksperimentelle vej som næsten en "livsbane", fordi man som forsker ofte får dyrt apparatur bevilget og derfor har en forpligtelse til at holde sit laboratorium kørende over mange år. Som den individualist jeg er, har det været sjovt at arbejde med computersimuleringer pga. den større fleksibilitet. Men som sagt: Det vigtigste er at følge sine interesser - ellers bliver det næppe god forskning, der kommer ud af det.

E-mail
Jeppe C. Dyre: dyre@ruc.dk