



Dr. Gianarelio Cuniberti vom Institut für Theoretische Physik der Universität Regensburg schaut durch eine von ihm entwickelte Folie, die er zur „Carbon Nanotube“ gerollt hat.

Forschen für ein besseres Verständnis komplexer Systeme

Von intelligenter Langsamkeit, Handlungsreisenden und einer neuen Ära: Nachwuchswissenschaftler entwickeln interdisziplinäre Theorieansätze

Wenn drei Physiker mit ihren Nachwuchsgruppen neue Theorien und Modelle entwickeln, um die Welt ein bisschen besser zu verstehen, wenn Begriffe fallen wie „ground states“, „bio-molecular systems“ oder „Invarianzen“, dürfen Sie – zu Recht – schwere Kost vermuten. Durchaus alltäglich allerdings sind die Ausgangspunkte, an denen die Reisen ins Land der Polynome, Operatoren und Algorithmen beginnen.

Der erste Ausgangspunkt sind Sie, während Sie diesen Text lesen. Die Tatsache, dass Sie ein geordnetes Bild klarer Zeilen vor sich sehen, ist keinesfalls selbstverständlich. Denn selbst wenn Sie Ihren Blick nur um eine halbe Zeile schweifen lassen, sehen viele Ihrer Sensoren, die vorher „Druckerschwärze“ an Ihr Hirn übermittelten, jetzt weiß; trotzdem sehen Sie weiterhin die gleichen Wörter. Dr. Laurenz Wiskott und sein Team vom Innovationskolleg Theoretische Biologie an der Humboldt-Universität Berlin extrahieren aus solchen schnell variierenden Sensordaten langsam variierende Merkmale. Ihr Ziel ist es, die „invariante Objekterkennung“ – eine Leichtigkeit für unser Gehirn, aber eine fast unlösbare Aufgabe für Rechner – zu verstehen.

Die Entdeckung der Langsamkeit

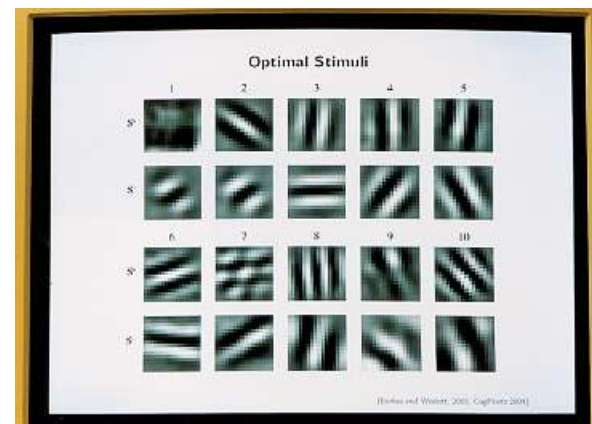
Dahinter stehen grundsätzliche Fragen: Wie organisiert sich das Gehirn? Die Gene zumindest können nicht ausschließlich verantwortlich sein. Sie enthalten viel zu wenig Informationen, um das Hirn zu verschalten. „Die ganzen intelligenten Leistungen“, schließt Wiskott, „müssen auf prinzipiell einfache Prozesse zurückzuführen sein.“ Sein Blick richtet sich nicht auf einzelne elektro-chemische Reaktionen, Kanäle oder Transmitter, sondern auf Selbstorganisation auf einer höheren, abstrakteren Ebene. Er nimmt an, dass die Selbstorganisation auf einigen einfachen Prinzipien beruht – und eines dieser Prinzipien heißt schlicht „Langsamkeit“.

Dabei geht es darum, für ein gegebenes Eingangssignal, wie es zum Beispiel die Bildsequenz des gelesenen Textes für das Sehsystem darstellt, Funktionen zu finden, die aus dem Eingangssignal möglichst langsam variierende Merkmale extrahieren. Die Merkmale sind dann idealerweise invariant, also unabhängig von den schnellen Blickbewegungen. Und sie repräsentieren die Worte weitgehend unabhängig von ihrer Position. Eine wichtige Voraussetzung für das Lesen.

Der 40-Jährige ist fasziniert von der Aussicht, ein tiefes Verständnis von dem zu gewinnen, was ein Hirn ausmacht. Und natürlich von den Möglichkeiten, die sich daraus für künstliche Gehirne ergeben. Dass Wiskott nicht Biologe ist, sondern theoretischer Physiker, ist dabei keineswegs Zufall. Denn im Mittelpunkt seiner Arbeit steht die Modellbildung, also die Übersetzung eines realen Vorgangs in ein mathematisches Modell – eine

Die Förderinitiative „Nachwuchsgruppen an Universitäten“ wurde von der VolkswagenStiftung 1996 etabliert mit dem Ziel, jungen, herausragend qualifizierten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern rasch zu einer eigenen Arbeitsgruppe zu verhelfen. Die Nachwuchsgruppe ist organisatorisch unabhängig, aber eingebettet in den Universitätsbetrieb – eine außergewöhnliche und sehr erfolgreiche Konstellation. Die Initiative ist seit 2003 beendet und fand ihre Nachfolgerin in den „Lichtenberg-Professuren“. Die hier vorgestellten Projekte zur Theoriebildung weisen zugleich auf die neue Förderinitiative „Neue konzeptionelle Ansätze zur Modellierung und Simulation komplexer Systeme“ hin, in der die ersten Vorhaben Ende 2004 bewilligt wurden.

Aus der Arbeit von Dr. Laurenz Wiskott: Die optimalen Stimuli (visuellen Reize), die bei den ersten zehn gelernten Funktionen eine besonders starke positive (S+) oder negative (S-) Antwort erzeugen, stellen sich wie im primären visuellen Kortex (V1) als Streifenmuster verschiedener Frequenzen und Orientierungen dar.





Das Doktorandenteam vom Innovationskolleg Theoretische Biologie mit seinem Nachwuchsgruppenleiter vor der Humboldt-Universität: Diplombiologe Christian Michaelis, Diplominformtiker Matthias Franzius, Diplomphysiker Tobias Blaschke, Dr. Laurenz Wiskott und Diplommathematiker Pietro Berkes (von links).

Kernkompetenz der Physik. Die ganze Bandbreite des interdisziplinären Ansatzes spiegelt sich in Wiskotts Team mit sechs Doktoranden und Post-docs: Mathematik, Informatik, Biologie und Physik – was an Fachgebieten benötigt wird, ist vertreten.

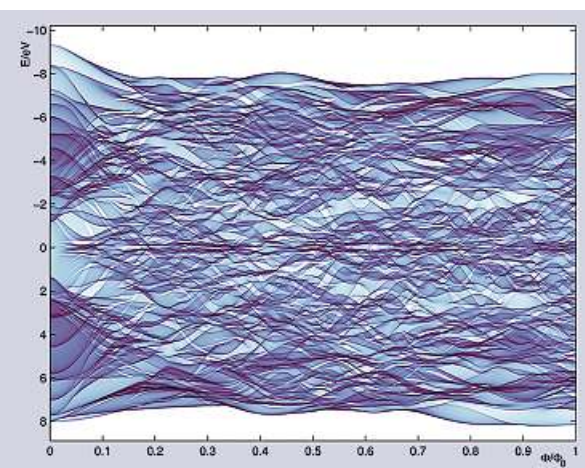
Kann denn nun „Langsamkeit“ helfen, die Funktion des Gehirns zu verstehen oder Objekte zu erkennen? Simulationen mit natürlichen Bildsequenzen zeigen, dass Funktionen, die mit dem Prinzip Langsamkeit gefunden wurden, funktionell den Neuronen im visuellen Kortex sehr ähnlich sind. Sie können also eine einheitliche Erklärung für viele verschiedene neuronale Eigenschaften liefern. Wiskott hat das Prinzip auch auf Sequenzen handgeschriebener Ziffern angewendet. Auf sehr einfache Weise ermöglichten dabei die gefundenen Funktionen Erkennungsraten, die nur von sehr aufwändigen, spezialisierten Systemen übertroffen werden. Systemen, an denen zum Teil bereits seit 15 Jahren gearbeitet wird. Dieser doppelte Erfolg ist ein gutes Beispiel dafür, wie fruchtbar die Wechselwirkung zwischen biologischer Modellierung und technischer Anwendung sein kann.

DNA für den Prozessor

Einen anderen Ausgangspunkt für wichtige neue Ansätze liefert der Computer, an dem Sie arbeiten. Ein Standard-PC verdoppelt alle eineinhalb bis zwei Jahre seine Leistungsfähigkeit, ohne dabei wesentlich größer zu werden. Dr. Gianaurelio Cuniberti und sein Team „Molecular Computing Group“ am Institut für Theoretische Physik der Universität Regensburg wissen, dass die Transistoren, wenn es so weitergehen soll, in absehbarer Zeit klein sein müssten wie Moleküle. Moleküle als elektronische Bauteile aber sind weitgehend Neuland. Die Regensburger Nachwuchsgruppe arbeitet deshalb im Grenzgebiet von Quantenphysik und Chemie an den theoretischen Grundlagen einer molekularen Elektronik.

Cuniberti, der nahtlos zwischen Italienisch, Englisch und Deutsch wechseln kann und Enthusiasmus für zehn versprüht, glaubt sogar an einen Paradigmen-Wechsel in der Computertechnik: „Die besten Silizium basierten Transistoren haben heute eine Gate-Länge von 90 Nanometern, aber wir werden Größenordnungen von einem Nanometer brauchen. Für uns ist die Silizium-Ära deshalb Vergangenheit.“

Die neue Ära basiert unter anderem auf sechseckigen Kohlenstoffringen. Zur Erläuterung rollt Cuniberti Folien zusammen, auf die solche Ringe wie Bienenwaben gedruckt sind. Er hat verschiedene Möglichkeiten, die bedruckte Folie so zur Röhre zu rollen, dass die Übergänge stimmen – und erhält anschauliche Modelle für so genannte Carbon Nanotubes (CN), die in der Realität einen Durchmesser von nur einem Nanometer, einem



Dichtheit der Zustände bei einer doppelwandigen „Carbon Nanotube“ in Abhängigkeit von der Energie und dem Fluss eines Magnetfelds, das senkrecht zur Achse der Röhre verläuft – eine Abbildung, die die Arbeit der Regensburger Nachwuchsgruppe von Dr. Gianaurelio Cuniberti illustriert. Visualisiert wird folglich die Entwicklung der Bandstruktur bei unterschiedlichen Magnetfeldern.

Milliardstel Meter, haben. Je nach Rolltechnik bleiben an den Kanten unterschiedliche Kohlenstoff-„Ärmchen“ stehen. Die CN heißen dann Armchair oder ZigZag. Das Phantastische ist: Nanotubes haben in Experimenten Transistoreigenschaften gezeigt. Sie halten höhere elektrische Ströme aus als eigentlich angenommen, und ihr Verhalten lässt sich durch die „Rolltechnik“ den Erfordernissen anpassen.

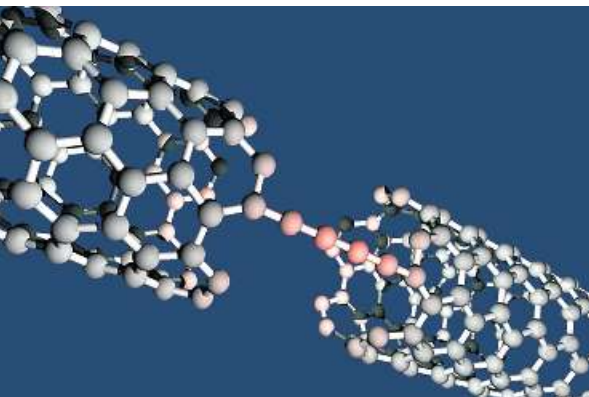
Leider muss Cuniberti an dieser Stelle ein großes „but“, ein „Aber“ seufzen. Denn: „Die getesteten Nanotubes wurden bislang noch in aufwändigster Handarbeit hergestellt. Der Widerstand, den Moleküle und Makromoleküle haben, ist kein klassisch ohmscher, sondern ein schwer zu berechnender quantenmechanischer. Das gilt auch für die Leitfähigkeit, die sich in Sprüngen verändert. Und vor allem: Die ersten Theorieansätze erklären die wenigen experimentellen Ergebnisse zwar qualitativ, aber nicht quantitativ korrekt.“ Das ist, in etwa, der Stand der molekularen Elektronik, einer sehr jungen Disziplin. Gianaurelio Cuniberti, 34 Jahre alt, hat seit Anfang 2003 ein international zusammengesetztes Team junger Doktoranden und Postdocs in Regensburg versammeln können. Mit den zurzeit acht Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern – und oft gemeinsam mit den experimentellen Physikern vom Flur nebenan – erforscht Cuniberti zentrale Aspekte, um schlüssige Theorien zu entwickeln und der molekularen Elektronik ein Fundament zu geben.

Um die Carbon Nanotubes beispielsweise kümmert sich Miriam Del Valle. Sie simuliert experimentell, wie sich eine „Kreuzung“ aus drei Nanotubes verhält. Schließlich nutzen molekulare Bauteile nur dann, wenn man sie auch miteinander verschalten kann. Marieta Gheorghe berechnet die Schwingungen einer Nanotube. Solche Schwingungen haben direkten und bisher nicht verstandenen Einfluss auf den Leitungstransport. Wieder andere Arbeiten drehen sich um weitere molekulare Systeme: Michael Hartung hat in seiner Diplomarbeit gerade das quantenmechanische Verhalten eines einzelnen Wasserstoff-Moleküls zwischen zwei Platinelektroden berechnet. Und mit der Leitfähigkeit von DNA beschäftigt sich Rafael Gutiérrez. Die DNA ist ein besonders interessantes Makromolekül, weil sie sich selbst erzeugen kann und je nach Sequenz und experimentellen Bedingungen ein Leiter, Halbleiter oder Isolator sein kann.

Einer anderen Art molekularer Signalübertragung, der so genannten Spintronik, widmet sich Norbert Nemeč. Ihn interessiert nicht die Ladung, sondern der Spin – eine magnetische Eigenschaft des Elektrons. Die Informationen, die per Spin zum Beispiel durch die Nanotubes übertragen werden, können dichter gepackt und besser gespeichert werden. Dass man mit Spintronik bereits heute rechnen – beziehungsweise: speichern – kann, beweist etwa das Stichwort „Giant Magneto-Resistance“. Auf diesem Weg lässt sich die Kapazität von Festplatten inzwischen extrem erhöhen.



Das Kohlenstoffmodell bestimmt ihren Forscheralltag; bei der Teambesprechung (oben) als auch beim Gruppenporträt auf dem Regensburger Campus: Diplomphysiker Norbert Nemeč, Diplomphysiker Michael Hartung, Dr. Rafael Gutiérrez, Dr. Marieta Gheorghe, Diplomphysikerin Miriam Del Valle (Universidad Autonoma Madrid) und Dr. Gianaurelio Cuniberti (von links).



Ein molekularer „Draht“ zwischen zwei Kohlenstoff-Nanoröhren – auch dieses ein Bild aus der Arbeit der Regensburger Nachwuchsgruppe.

Die Industrie auf jeden Fall wartet schon auf diese Erkenntnisse aus der Wissenschaft – so wie jener große Prozessor-Hersteller, der bei einer Konferenz über molekulare Elektronik die Physiker beschwor, sie mögen doch einfach nur sagen, wie es funktioniere. Die Herstellung würden seine Ingenieure dann schon übernehmen ...

Keine Chance für Handlungsreisende

Zurück zu den Spins. Sie sind auch im Visier der dritten Nachwuchsgruppe, für deren Arbeit aber zunächst einmal die Aufforderung eines Fahrkarten-Automaten der Bahn unser Ausgangspunkt sein soll: „Geben Sie Ihr Reiseziel ein und wählen Sie die Städte, die auf Ihrer Route liegen sollen.“ In wenigen Sekunden bietet der Automat die schnellsten Verbindungen. Für einen Handlungsreisenden – oder die Post oder einen Möbel-Auslieferer –, der ein paar Dutzend Ziele ansteuern und dann wieder heimkehren will, gibt es dagegen kein Programm, das in akzeptabler Zeit die optimale Tour berechnet. Wieso? Für dieses und ähnliche Rätsel zwischen Physik und Informatik suchen Dr. Alexander Hartmann und sein Nachwuchsgruppenteam vom Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen eine Lösung.

„Manchmal klingen die Aufgaben so total simpel, und man denkt sich: ‚Moment, das kann doch nicht sein, dass das schwierig ist‘ ...“, sagt Hartmann, 36, Physiker und Informatiker. Aber es ist schwierig – und im Fall der Reiseroute für den Handlungsreisenden „schwierig“ auch im ganz speziellen Informatiker-Sinn. Es handelt sich nämlich um ein so genanntes



Wenn sich alles so einfach mit Beziehungspfeilen darstellen und lösen ließe ...

Dr. Alexander Hartmann (links), Physiker und Informatiker an der Universität Göttingen, mit seinem Nachwuchsgruppenteam (von links: die beiden Diplomphysiker Wolfgang Barthel und Hennig Löwe sowie die Studentin der Volkswirtschaftslehre Saskia Bellem)

„NP-hartes“ Problem. Der entscheidende Unterschied zu einer normalen Bahnfahrt, die ein „leichtes“ Informatikproblem darstellt, lautet: Es ist keine Reihenfolge vorgegeben. Bisher hat noch niemand einen Optimierungsalgorithmus gefunden, dessen Laufzeit nicht im schlimmsten Fall exponentiell mit der Zahl der anzusteuern Städte anwachsen würde und damit letztlich unbrauchbar wäre. Noch ist nicht klar, ob es wirklich keine einfache Lösung gibt, oder ob sie einfach noch nicht gefunden wurde. Dieses – verallgemeinerte – Problem zählt für das Clay Mathematics Institute in Cambridge (Massachusetts) immerhin zu den sieben „Millennium-Rätseln“ der Mathematik. Jeweils eine Million Dollar Preisgeld hat das Institut für die Lösung jedes dieser Probleme bereitgestellt.

So schnell also führt die Reise vom Bahnautomaten ins Herz der theoretischen Informatik und in die vierte Etage des neuen Physik-Instituts der Universität Göttingen. Hier bewegen sich Alexander Hartmann und sein fünfköpfiges Team aus Nigeria, Italien, Mexiko und Deutschland zwischen Festkörperphysik, Informatik und Molekularbiologie. Sie erforschen und verbessern Optimierungsalgorithmen, um sie auf naturwissenschaftliche Probleme anzuwenden. Umgekehrt helfen ihnen naturwissenschaftliche Modelle, Probleme aus der Informatik zu lösen.

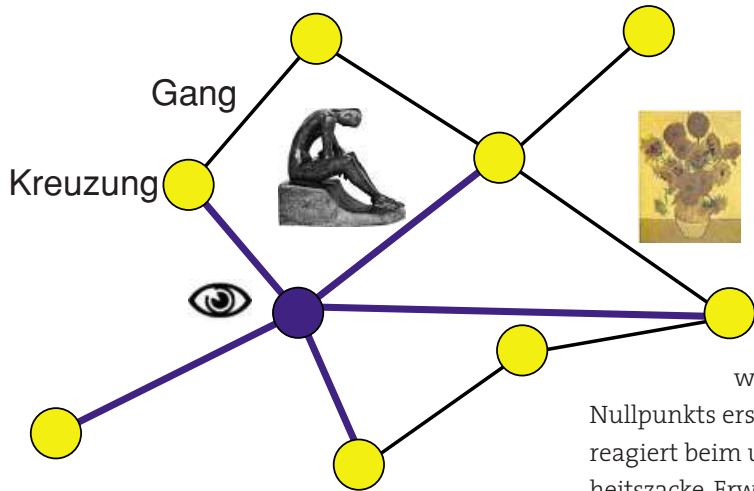
Zum Beispiel kann man den „Handlungsreisenden“ in ein physikalisches Spinglas überführen, einem Modell aus der Festkörperphysik, das aber auch zum Verständnis Neuroner Netze eingesetzt wird. Das heißt: Aus der Frage „Hat der Reisende die kürzestmögliche Strecke genommen“ wird nach einigen Umwegen die Grundzustands-Frage „Stehen die Spins so, dass sie möglichst wenige Regeln verletzen?“.

Hartmanns Ziel ist es, grundsätzliches Verständnis dafür zu entwickeln, warum und wann Probleme schwierig sind. Und damit bewegen wir uns quasi auf die Meta-Ebene der schwierigen Probleme zu. Eine Erkenntnis von Hartmanns Nachwuchsforschergruppe: Wenn ein System physikalisch schwierig ist, ist es auch algorithmisch schwierig. Das ist nur auf den ersten Blick trivial. Denn „in echt“ bewegen sich Teilchen in der Zeit. In der Informatik nicht.

Ein Augenmerk gilt den „Phasenübergängen“. Wenn man bei Wasser die Temperatur auf 100 Grad steigen lässt, bekommt man einen Phasenübergang zum Dampf. Bei schwierigen Systemen verändert man zum Beispiel die „Ungeordnetheit“ und bekommt einen Phasenübergang zu „nicht-schwierigen“ Bereichen des Problems. Mit Hilfe des Spinglas-Modells und eines solchen Phasenübergangs konnten die Göttinger zum Beispiel schon den „nicht-schwierigen Bereich“ eines typischen Informatik-Problems finden, des Vertex-Cover-Problems – im täglichen Leben auch bekannt als Stundenplanoptimierung oder das „Wie-viele-Wächter-braucht-mein-Museum“-Problem.

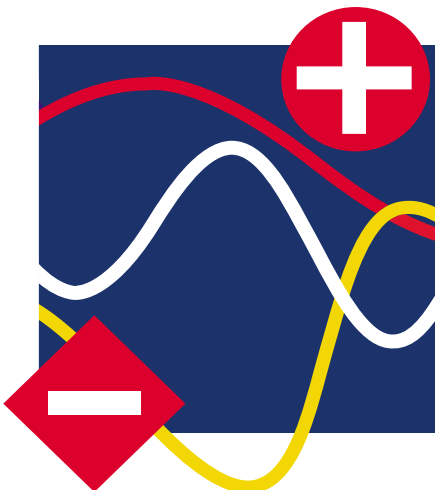


Konzentrierte Atmosphäre: Nachwuchsgruppenleiter Dr. Alexander Hartmann und Mitarbeiter Wolfgang Barthel bei der Klärung eines Problems.



Eine merkwürdige Beobachtung führte die Forscher noch einen Schritt weiter. Ursprünglich wurden die Spin-Glas-Modelle für ungeordnete magnetische Systeme entwickelt. In diesen Systemen treten nun nahe des absoluten Nullpunkts erstaunliche Phasenübergänge auf: Ein Messwert des Systems reagiert beim unregelmäßigen Abkühlen mit so etwas wie einer Trägheitszacke. Erwärmt man das System dann gleichmäßig, wandert der Messwert genau entlang dieser Abkühlungskurve; er wiederholt unerklärlicherweise das Trägheitsverhalten rückwärts – als hätte er ein Gedächtnis. Diesen Memory-Effekt versuchen die Wissenschaftler zu verstehen. Er scheint immer dann aufzutreten, wenn das zugehörige Informatikerproblem „hart“ ist.

Eine gute Lehrmeisterin hat das Team in der Natur – sie scheint die konkurrenzlos beste Optimiererin zu sein. Fledermäuse etwa, die viele Blüten optimal anfliegen müssen, um satt zu werden, lösen dabei – so vermutet Hartmann – nebenbei das schwierige Problem des Handlungsreisenden (bei diesem Teilprojekt kooperieren die Göttinger mit der ebenfalls stiftungsgeförderten Nachwuchsgruppe von Dr. York Winter an der Universität München). Ein weiteres Beispiel: die verschlungene und komplizierte, dabei optimale Faltung der Proteine in der Zelle. Innerhalb einer Zelle falten viele kleine „Maschinchen“ das Protein binnen Minuten – und zwar in genau den Zustand, der für die Funktion des Proteins der günstigste ist. Es gibt (noch) keine Algorithmen, dies nachzubilden.



Die VolkswagenStiftung unterstützt die drei Projekte in Berlin, Regensburg und Göttingen mit jeweils rund einer Millionen Euro – und setzt damit gleichsam ein Ausrufezeichen für die Förderung der Theoriebildung und ein besseres Verständnis komplexer Systeme. Um auch in Zukunft viel versprechende Ansätze für Theorien an den Schnittstellen der Disziplinen gezielt fördern zu können, hat die Stiftung im vergangenen Jahr den Schwerpunkt „Neue konzeptionelle Ansätze zur Modellierung und Simulation komplexer Systeme“ eingerichtet. Denn gerade mit einem interdisziplinären Blick entdeckt man nicht nur viele weiße Flecken auf der Karte unseres Wissens, sondern auch neue, ungewöhnliche Wege, sie zu füllen. Frei nach dem Motto: „Es gibt noch viel zu verstehen – modellieren wir es“.

Viele Fragen aus dem praktischen Leben spielen in abstrakter mathematischer Form in der theoretischen Informatik eine wichtige Rolle. Dazu gehört auch die optimale Verteilung von Wächtern in einem Museum – in der mathematischen Sprache ein „graphentheoretisches Problem“, das Knotenüberdeckungsproblem. Unten: das Logo der Göttinger Nachwuchsgruppe

Julia Förster