

Mathematik und Materialwissenschaften

Multiskalenprobleme und die Suche nach dem Wesentlichen

Wir haben bei der letzten, sehr anregenden Diskussion schon gesehen, daß die Mathematik und die Physik eng miteinander verwoben sind und sich schon lange gegenseitig befruchtet haben. Der Beitrag von Herrn Huisken zur allgemeinen Relativitätstheorie hat dies eindrucksvoll illustriert. Niemand würde heute ernsthaft eine große neue physikalische Theorie vertreten, die nicht mathematisch formuliert ist.

Wir haben aber auch gehört – und wir sehen das auch täglich –, daß die Mathematik zunehmend auch in andere Natur- und Ingenieurwissenschaften eindringt. Welche Rolle kann sie dabei spielen? Wenn wir jetzt 50 Jahre weiter denken: Wird dann die Mathematik in der Chemie, in der Biologie oder in den Materialwissenschaften die gleiche zentrale Rolle spielen, die sie heute in der Physik einnimmt, oder sind diese Naturwissenschaften – von den Sozial- und Geisteswissenschaften will ich gar nicht reden – schon so anders, daß es im Grunde keine tiefe Interaktion mit der Mathematik geben wird, sondern nur Hilfestellung für viele konkrete Fragen? Zu diesem großen Komplex möchte ich nur einige kleine, persönliche Bemerkungen machen, sozusagen aus Sicht eines Mathematikers mit einem gewissen Interesse an den Materialwissenschaften. Einige Gedanken sind möglicherweise auch relevant für die Interaktion von Mathematik und Biologie, aber da werden wir von Herrn Reich in seinem Vortrag „Mathematisierung des Lebens“¹ im Rahmen der Akademievorlesung eine viel ausführlichere und tiefgründigere Darstellung hören.

Ein genereller Trend in allen Naturwissenschaften ist, daß wir die elementaren Prozesse immer besser verstehen und auflösen können. In der Biologie werden immer mehr Genome komplett erschlossen und – was vielleicht noch wichtiger ist – immer mehr Signalketten. Wir können zum Teil die Funktion einzelner Biomoleküle quasi mechanisch nachvollziehen. In den Materialwissenschaften läßt sich inzwischen Materie auf der Ebene einzelner Atome manipulieren. Es gibt auch zunehmend bessere theoretische Modelle,

¹ Vgl. Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften (Hg.), Berichte und Abhandlungen, Band 11, Berlin: Akademie Verlag (in Vorbereitung).

die das Verhalten einzelner Atome oder kleinerer Gruppen von Atomen schon mit hoher Präzision vorhersagen können. Wenn man das im Hinterkopf hat, könnte man sich vielleicht zunächst zu zwei radikalen Thesen hingerissen fühlen:

These 1: Wenn die elementaren Prozesse verstanden sind, ist die Erklärung komplexen Materialverhaltens *im Prinzip* nur ein Frage mathematischer Deduktion.

These 2: Wenn die elementaren Prozesse verstanden sind, braucht man gar keine Mathematik mehr, sondern nur einen hinreichend großen Computer.

Ich denke, beide Thesen haben einen gewissen Charme, aber persönlich halte ich sie für völlig falsch. Was die erste These betrifft, so ist das entscheidende Wort „im Prinzip“. Schon ein einfacher Gegenstand des alltäglichen Lebens, wie beispielsweise die Kaffeetasse vor Ihnen, enthält größenordnungsmäßig die enorme Zahl von 10^{23} Atomen. Das Verhalten jedes einzelnen Atoms zu verstehen, ist nicht nur quantitativ völlig unmöglich, es ist auch gar nicht erstrebenswert, da wir in einem Datenmüll ertrinken würden.

Historisch war es auch ganz anders. Wir haben ein sehr gutes Verständnis des elastischen Verhaltens von Materialien gehabt, lange bevor überhaupt die atomare Theorie bewiesen war. Dieses Verständnis begann mit einer mathematischen Fiktion, dem Kontinuum. Reale Materie ist sicherlich nicht kontinuierlich, aber sehr viele Prozesse und Fragen der praktischen Ingenieurwissenschaften ließen sich mit der Kontinuumsvorstellung hervorragend verstehen, und auch viele fundamentale, strukturelle Erkenntnisse sind damit möglich geworden, weil die mächtigen Methoden der Infinitesimalrechnung auf kontinuierliche Systeme angewendet werden können. Leonhard Euler, der ja mit dieser Akademie aufs engste verbunden ist, war hier ein Pionier.

Jetzt könnten Sie einwenden, daß es zumindest für die numerische Berechnung, die heute zunehmend an Bedeutung gewinnt, gut wäre, von einem diskreten Modell auszugehen. Dieses Modell ist zwar möglicherweise sehr groß, aber zumindest endlich. Auch das halte ich für falsch, denn hier ist ebenfalls häufig das Kontinuum der bessere Ausgangspunkt. Wenn ich mich nämlich von der ursprünglichen diskreten atomaren Vorstellung einmal gelöst habe, dann steht mir wieder völlig frei, wie ich dieses Kontinuum durch die endliche Zahl von Freiheitsgraden, die ich zur Verfügung habe, beschreiben kann. Herr Deuffhard kann sicherlich viele Beispiele nennen, bei denen es viel besser ist, eine künstliche Approximation des Systems zu betrachten, die über ein unendlichdimensionales Modell als Zwischenschritt geht, anstatt mit einem scheinbar natürlichen endlichdimensionalen Modell zu beginnen. Dieser Umweg über ein idealisiertes unendlichdimensionales Modell ist oft überhaupt erst der Schlüssel zur effizienten Berechnung.

Das Kontinuum reicht aber letztlich nicht. Wenn Sie Ihre Kaffeetasse fallen lassen, dann wird sie zersplittern. Ein Stahlbecher dagegen wird vielleicht eine kleine Beule davontragen, aber nicht zersplittern. Dieser Unterschied läßt sich in der rein elastischen, idealen Kontinuumswelt nicht mehr so einfach verstehen. Wir könnten das Modell durch weitere Parameter erweitern, aber der entscheidende Punkt ist, daß Keramiken anders sind als Metalle. Wenn man das etwas genauer studiert, zeigt sich, daß neben der kleinsten Skala der einzelnen Atome und der ganz großen Skala, auf der wir beobachten, intermediäre Skalen eine entscheidende Rolle spielen. Es gibt Versetzungen, es gibt Einschlüsse, Korngrenzen, Phasengrenzen usw. Dies führt zu einer Hierarchie von Skalen, auf denen interessante Phänomene passieren.

These 3: Die große Herausforderung ist, solche *Multiskalenprobleme* zu verstehen.

Hier hat übrigens Einstein einen wesentlichen Beitrag geleistet – eine der drei großen Arbeiten, die wir dieses Jahr feiern, ist die Arbeit zur Brownschen Bewegung. Dabei geht es genau darum, wie die winzigen thermischen Bewegungen sehr vieler kleiner Teilchen die Bewegung eines viel größeren Testteilchens beeinflussen. Diese Bewegung ist scheinbar erratisch, aber in ihrem statistischen Verhalten sehr präzise vorhersagbar.

Bis jetzt habe ich hauptsächlich von großen Systemen gesprochen – Systemen mit sehr vielen Komponenten –, aber wir wissen durch Poincarés Arbeiten zur Himmelsmechanik und durch das, was man heute Chaostheorie nennt, daß selbst schon sehr kleine Systeme ein sehr komplexes und in einem wohldefinierten Sinne chaotisches Verhalten zeigen. Das heißt, auch von diesen Systemen können wir überhaupt nicht erwarten, daß sie eine vollständige Vorhersage zulassen. Das bringt mich zu meiner letzten These.

These 4: Eine zentrale Rolle der Mathematik ist es, zu identifizieren, welche Phänomene robust vorhersagbar sind.

In diesem Sinne beschränkt sich die Mathematik nicht auf die Erklärung von Beobachtungen, sondern sie hilft uns zu erkennen, was sich sinnvoll beobachten und vorhersagen läßt. Ein Beispiel mag dies verdeutlichen. Heutzutage kann man leicht große Computersimulationen durchführen und entsprechend komplizierte Bilder erzeugen. Die Frage ist: Was an dem Bild ist eine interessante Vorhersage und was ein rein zufälliger Teil, der sich unter kleinsten Veränderungen der Parameter oder der Berechnungsmethode völlig verändert und den man gar nicht mit der Realität vergleichen sollte. Die Mathematik hat schon wichtige Beiträge in dieser Richtung geleistet, zum Beispiel mit dem Ito-Kalkül für zufällige Prozesse, der unter anderem Grundlage der Berechnung von Derivaten an den

Finanzmärkten ist. Die meiste Arbeit liegt aber sicher noch vor uns, und mathematische Strukturen, die uns bei komplexen Problemen die relevante Information, das Wesentliche extrahieren, sind zum großen Teil erst noch zu schaffen.