



Christoph Pöppe
Redakteur dieses Sonderhefts

Die Berechnung der Welt – oder wenigstens eines Erythromycinmoleküls

Bis heute erregt der »Dämon« des Mathematikers und Astronomen Pierre-Simon Laplace (1749–1827) die Gemüter der Philosophen: Ein Wesen mit vollständiger Kenntnis der Naturgesetze könnte aus dem Zustand der Welt zu einem bestimmten Zeitpunkt ihren Zustand für alle Zukunft berechnen. Da somit die gesamte Zukunft bereits jetzt vorherbestimmt wäre und sich das mit unserer Überzeugung vom freien Willen nicht verträgt, haben sich viele Leute große Mühe gegeben, die Voraussetzungen des laplaceschen Determinismus zu erschüttern: Vollständige Kenntnis der Welt zu einem Zeitpunkt sei prinzipiell unmöglich; und selbst wenn man sie hätte, würde der Rechenaufwand zur Bestimmung der Zukunft jedes denkbare Maß übersteigen.

Na ja – der atemberaubende und immer noch andauernde Fortschritt in der Rechenleistung der Computer hat schon manches möglich gemacht, das prinzipiell unmöglich wirkte. Das scheint dem letzten Argument den Boden zu entziehen. Werden wir am Ende doch alle berechenbar? Nutzen Google und/oder die NSA das etwa schon?

Sicher nicht in der Vollständigkeit, die Laplaces Ideen zu Grunde liegt. Welches Bild der Welt – oder eines begrenzten Systems – auch immer die Wissenschaftler in den Computer stecken: Es ist stets eine Vereinfachung. Mathematische Modellierung bleibt eine Kunst: die höchst unübersichtliche Vielfalt der echten Ereignisse so zu reduzieren, dass das Wesentliche erfasst wird und seine Dynamik berechenbar bleibt. Und selbst wenn das System so klein ist wie ein Molekül des Antibiotikums Erythromycin samt dem Ribosom, dessen Aktivität es blockiert, treibt die Berechnung seines Verhaltens die modernsten Supercomputer an ihre Leistungsgrenzen (siehe den Beitrag auf S. 28). Wer größere Einheiten wie das ganze Leben eines Einzellers modellieren will, muss stärker vereinfachen (S. 38).

Die Physik bietet viele Vereinfachungen an, die auch große Systeme berechenbar machen. So kann man in vielen Fällen einen ausgedehnten Körper durch einen Massenpunkt ersetzen oder die Bewegungsenergie vieler Moleküle durch einen Mittelwert namens Temperatur, ohne das Wesentliche aus dem Blick zu verlieren. Bei der Strömungsdynamik allerdings führen solche Bemühungen bis heute nicht zum vollen Erfolg. Empirische Regeln wie die von Ludwig Prandtl (S. 66) entdeckten müssen als Ersatz herhalten, und wo Bakterien sich mit Flimmerhärchen durchs Wasser treiben (S. 14), funktioniert eine sehr eigenwillige, aber gut berechenbare Näherung an die Moleküldynamik.

Das ist kein Zufall: Häufig kommt es auf die elementaren physikalischen Gesetze, die ein Systemverhalten bestimmen, gar nicht an. Vielmehr ist das Zusammenwirken vieler Faktoren das Wesentliche (S. 6).

Herzlich Ihr

Christoph Pöppe