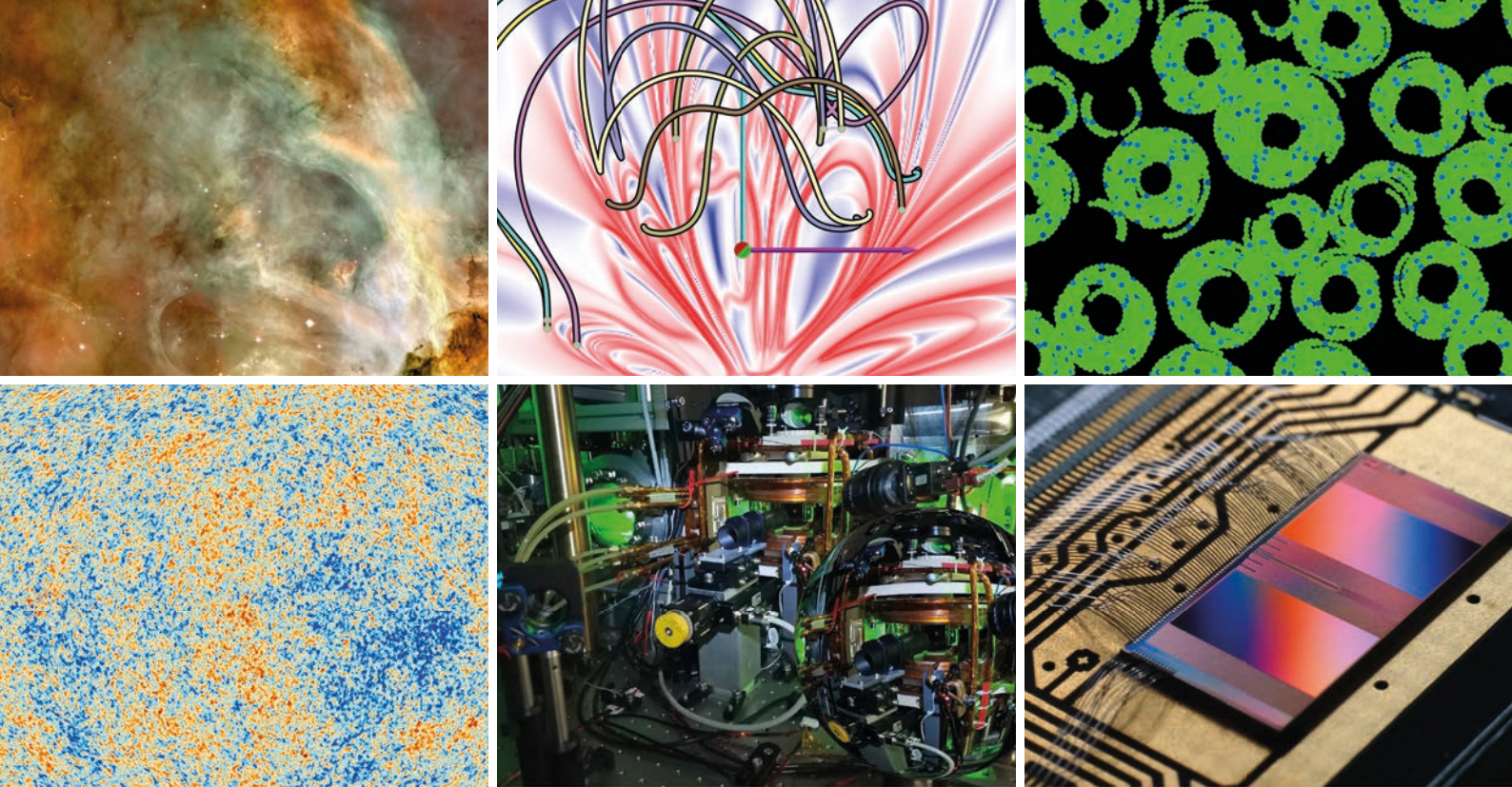




Hubble Heritage Team (STScI/AURA); N. Smith (Univ. of California, Berkeley) and NOAO/AURA/NSF / A. Sagristà et al., IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. 23, 950 (2017) / P. Patra et al., Nat. Phys. 18, 586 (2022) / ESA and the Planck Collaboration / Celia Viernann / Eric Müller, Heidelberg University (CC BY-ND 4.0)

Eine Struktur für Strukturen

Im Exzellenzcluster Structures der Universität Heidelberg geht es darum, die Entstehung und Rolle von Struktur in einem weiten Bereich von Naturphänomenen aufzudecken.

Alexander Pawlak

Vom interstellaren Staub bis zu Planeten, von Biomolekülen bis zu lebendem Gewebe, von den subatomaren Teilchen bis zum Universum ... all das gehört zum Themenbereich des Exzellenzclusters „Structures“, der 2018 in der zweiten Förderlinie der Exzellenzstrategie bewilligt wurde. Thematisch breiter kann ein physikalischer Exzellenzcluster eigentlich nicht aufgestellt sein, so erscheint es auf den ersten Blick. Auf den zweiten Blick zeigt sich der Querschnittscharakter des Clusters, denn es geht darum, Strukturen zu finden, welche Phänomene der genannten Forschungsbereiche miteinander verbinden.

Basis des Clusters ist die enge Beziehung zwischen Mathematik und Physik sowie Computational und Data Sciences in Heidelberg, befördert unter anderem durch die Heidelberger Partnerschaft Mathematik-Physik, das interdisziplinäre Zentrum für wissenschaftliches Rechnen (IWR) und das European Institute for Neuromorphic Computing (EINC). Eine breit gefächerte Gruppe von Wissenschaftler:innen aller Karrierestufen traf sich in einem wöchentlichen „Jour fixe“, um diese Zusammenarbeit noch weiter auszubauen, und bildete so den Keim des Clusters STRUCTURES. Analysis, Geometrie und Topologie, universelle Konzepte und Methoden der theoretischen

Physik, moderne Algorithmik und innovative experimentelle Realisierungen für analoge Rechner werden im Cluster kombiniert, um konkrete Fragen der Strukturbildung und -erkennung quantitativ zu beantworten und unser allgemeines Verständnis emergenter Phänomene und Strukturen zu vertiefen.

„Das ist eine wirklich interdisziplinäre Sache“, sagt Manfred Salmhofer vom Institut für Theoretische Physik der Universität Heidelberg, einer der drei Sprecher des Clusters. Er forscht in den Bereichen theoretische und mathematische Physik sowie der Physik komplexer Systeme. „Ohne unser Zutun sind wir mittlerweile auf drei Fakultäten verteilt, denn 2021 wurde an der Universität eine ingenieurwissenschaftliche Fakultät gegründet“. Deren Schwerpunkte liegen in technischer Informatik, wissenschaftlichem Rechnen, molekularer Biotechnologie und Pharmazie.

Vier grundlegende Fragen verschränken die Forschungsprojekte im Cluster miteinander:

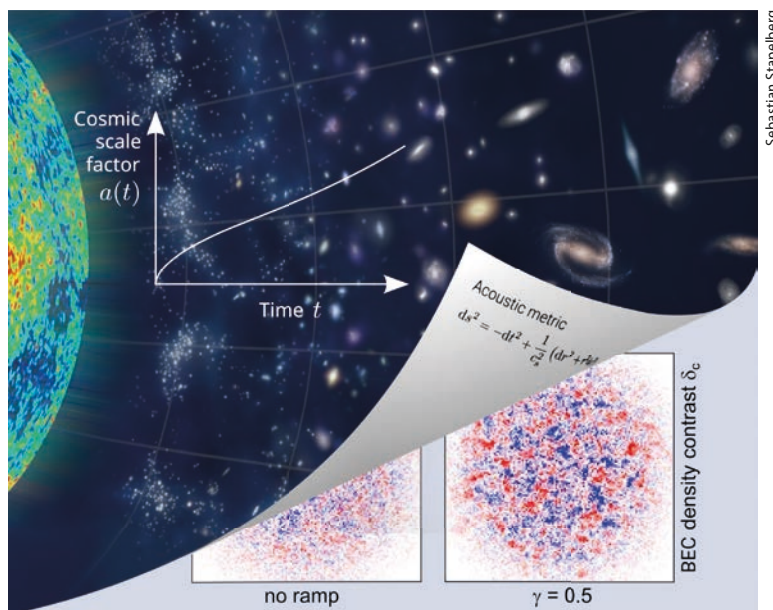
- Wie entsteht Struktur?
- Wie detektiert man Strukturen?
- Welche Zusammenhänge gibt es zwischen physikalischer Struktur und mathematischer Struktur?
- Wie kann man Struktur nutzen?

denes Element kommt aus der Mathematik, die topologische Datenanalyse. Diese untersucht – auf abstrakte Weise – die „räumliche Gestalt“ höherdimensionaler Datensätze, um Informationen zu extrahieren, die auf anderem Wege nicht zugänglich sind.

Neuartige Anwendungen im Bereich der Physik stammen aus den Arbeiten am EINC, bei denen es darum geht, neuartige Computerarchitekturen zu konstruieren, die auf komplexen, aber hochkontrollierten physikalischen Systemen basieren. Ein Beispiel davon wurde vorher im Zusammenhang mit dem Quantensimulator genannt. Es werden aber auch klassisch-komplexe Systeme untersucht, deren Strukturen vom menschlichen Hirn inspiriert sind, wie die neuromorphe Hardware BrainScales. Die Kombination von beidem schlägt sich im CP5 „Quantum Systems and Neural Networks“ nieder, wo sich etwa die Arbeitsgruppe zur Quanten-Vielteilchen-Dynamik mit der „Quanten-Tomographie“ befasst, also der möglichst vollständigen Rekonstruktion von präparierten Quantenzuständen aus einer Reihe von Messungen. Hier steigt der Aufwand exponentiell mit der Anzahl der Teilchen. Mit Ansätzen, die durch maschinelles Lernen inspiriert sind, lässt sich dieser Herausforderung jedoch begegnen, da man damit die Mannigfaltigkeit der Versuchszustände einschränkt, in welcher der experimentell vorbereitete Zustand gesucht wird. Insbesondere ermöglichte es die Zusammenarbeit innerhalb von Structures, neuromorphe Hardware zu verwenden und so zu optimieren, dass sich die Kodierung von Bell-Zuständen und Quantengrundzuständen demonstrieren ließ.

Die Verarbeitung großer Datenmengen mit Methoden des Maschinellen Lernens ist Gegenstand des CP6 „Networks and Machine Learning“. Dabei geht es nicht nur um die Anwendung, sondern darum, in die „Black Box“ der neuronalen Netze zu schauen, um besser zu verstehen, was darin vorgeht und warum diese besser sind, wenn sie aus vielen Schichten bestehen. „Maschinelles Lernen wirft viele mathematische Fragen auf und eröffnet einen interdisziplinären Zugang, bei dem auch Forschende aus Computerwissenschaft und Physik zentrales theoretisches Verständnis beisteuern können, um weiterzukommen“, sagt Anna Wienhard.

Ein wichtiger Aspekt des Clusters ist, dass nicht nur die Mathematik auf die Physik wirkt, sondern dies auch umgekehrt gilt. Diesem Thema widmet sich das siebte Comprehensive Project „Quantum Geometry and Topological Methods in Physics: From Spectral Networks to Intersection Homology“. „Es gibt interessante Anwendungen, bei denen gewisse Strukturen in der theoretischen Physik zu Entdeckungen in der Mathematik führen“, sagt Anna Wienhard. Hierzu zählen die „Dualitäten“, die mathematische Beziehungen zwischen zwei Arten von physikalischen Theorien postulieren, z. B. die sogenannte AdS/CFT-Korrespondenz, die eine Verbindung zwischen Stringtheorie und



Vom Labor bis zum Kosmos: Mit Bose-Einstein-Kondensaten lassen sich Prozesse aus der Frühzeit des Universums simulieren.

der Quantenfeldtheorie etabliert. Die Dualitäten eröffneten darüber hinaus neue Wege für die reine Mathematik, die solche Strukturen bis dahin nicht im Blick gehabt hatte.

Austausch ohne Hürden

Aufgrund seines interdisziplinären Ansatzes ist der Cluster sehr flexibel konzipiert. Die bislang über 30 kleineren Exploratory Projects (EP) dienen dazu, neue Ideen auszuprobieren und weitere Verbindungen zwischen den CPs zu etablieren. Zweimal im Jahr gibt es Calls für die EPs, auf die man sich bewerben kann. Solche Projekte befassen sich beispielsweise mit neuen Methoden zur Analyse von Daten einzelner Zellen, der Untersuchung kosmischer Strukturen anhand von Gravitationswellen oder der Vorhersage der Dynamik von Covid-19-Erkrankungen.

Die Corona-Pandemie hat natürlich auch ihre Auswirkungen auf die Arbeit des Exzellenzclusters Structures gehabt.²⁾ Alle Beteiligten waren daher froh, als der freitägliche „Jour fixe“ auch wieder in persona stattfinden konnte. Vorträge mit Pause und informelle Diskussionen fördern dort die intensive Kommunikation zwischen allen Mitgliedern des Clusters. „Das bedeutet für die Vortragenden mehr Mühe als sonst, da das breitgefächerte Publikum letztlich eine allgemeinverständliche Aufbereitung erfordert. Das nützt aber sehr, um den eigenen Horizont und den der anderen zu erweitern“, sagt Wienhard. Die Hürde, Kolleginnen und Kollegen in anderen Bereichen anzusprechen und direkte

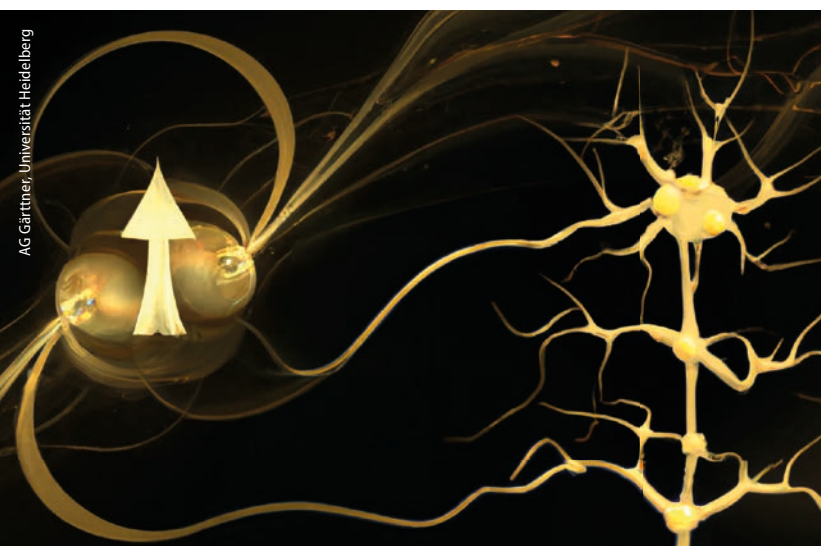
Die Exzellenzcluster

In loser Folge stellt das Physik Journal die Cluster der Exzellenzstrategie mit Schwerpunkt in der Physik bzw. starker Beteiligung von Physikerinnen und Physikern vor.



1) Vgl. Physik Journal, Februar 2023, S. 18

2) Trotz der schwierigen Umstände konnte die vom Cluster organisierte Ringvorlesung zum Thema Strukturen im Wintersemester 2021/22 stattfinden. Die Videos der Vorträge finden sich auf bit.ly/40Geb0H.



Forschungen im Exzellenzcluster Structures bringen quantenmechanische Systeme und neuartige neuromorphe Computertechnologie in Verbindung, hier symbolisiert durch ein neuronales Netz in Wechselwirkung mit einem Quantenspinsystem. Diese künstlerische Darstellung wurde mithilfe einer künstlichen Intelligenz erzeugt.

Kontakte aufzubauen, wären ohne den Exzellenzcluster viel höher, ist sie überzeugt.

Mit Wiederaufnahme der Büroarbeit vor Ort Anfang Juli 2022 wurden auch die neuen Räume des Clusters im Heidelberger „Mathematikon“ fertig. Der Gebäudekomplex beheimatet seit 2017 die Institute und Einrichtungen der Fakultät für Mathematik und Informatik sowie das interdisziplinäre Zentrum für wissenschaftliches Rechnen IWR. Zwei Büros mit Kinderspielecke ermöglichen Structures-Mitgliedern, Forschung und Kinderbetreuung unter einen Hut zu bringen. Sie sind ein Element der wissenschaftlichen Nachwuchsförderung (Structures Training and Education Program for Success, STEPS) im Rahmen des Clusters, die auf Chancengleichheit, Diversität und Familienfreundlichkeit abzielt.

Nachhaltig interdisziplinär

„Wichtig sind die wissenschaftlichen Fragen, die uns antreiben. Es geht nicht darum, über Strukturen um der Interdisziplinarität willen zu reden, sondern dass aus dem intensiven Austausch auch wirkliche Forschungsanstrengungen hervorgehen“, betont Markus Oberthaler. Daher konzentrieren sich die Aktivitäten des Clusters innerhalb der Universität vor allem auf die Forschung. Die beteiligten Nachwuchswissenschaftler:innen, angefangen bei fortgeschrittenen Master-Studierenden, werden allerdings in einem interdisziplinären Umfeld groß, das ihre Ausbildung auf forschungsorientierte Weise prägt. Workshops widmen sich praktischen Aspekten wie Software-Tutorials und Datenauswertung. Außerdem veranstaltet der „Young Researchers Convent“ eigene Workshops.

Mit der Einrichtung des Clusters werden insgesamt acht Professuren neu besetzt, die Hälfte als Nachfolgen oder vorgezogene Nachfolgen, die andere Hälfte ist neu geschaffen. Besetzt wurden bisher vier davon, zwei befassen sich aus

experimenteller bzw. theoretischer Perspektive mit der Physik quantenmechanischer Vielteilchensysteme, zwei mit reiner Mathematik und mathematischer Physik. Zwei weitere Berufungsverfahren laufen noch, beide in Computational Physics, und zwar eine mit Anwendungen in der Astrophysik und die andere mit Anwendungen in der Biophysik.

Eine weitere noch offene Position ist eine der drei sogenannten Brückenprofessuren, die sowohl zur Fakultät für Mathematik und Informatik als auch zur Fakultät für Physik und Astronomie gehören. Die zwei bereits besetzten Brückenprofessuren verbinden zum einen theoretische Hochenergiephysik mit algebraischen sowie analytischen Teilgebieten der Geometrie und zum anderen mathematische Physik, Quantenfeldtheorie und Quantengeometrie. „Die Brückenprofessuren spielen eine besondere Rolle in der Verbindung der wissenschaftlichen Aktivitäten in den beiden Fakultäten. Sie sind deshalb für den langfristigen Einfluss des Clusters auf die Universität von besonderer Bedeutung“, sagt Manfred Salmhofer.

Der Exzellenzcluster hat von Anfang an gezielt neue Mitglieder aufgenommen. Derzeit sind es etwa 150, von denen etwa 100 zum Young Researchers Convent gehören. Es wird bewusst keine formelle Grenze zwischen „Principal Investigators“ und „weiteren Mitgliedern“ gezogen. „Ausschlaggebend sind Interesse und Engagement“, sagt Anna Wienhard, die mittlerweile zum Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig gewechselt ist, dem Cluster aber als externes Mitglied verbunden bleibt. Als Sprecherin des Clusters folgt ihr Anna Marciniak-Czochra vom Institut für angewandte Mathematik nach.

„Der Cluster ist nicht einfach dafür da, etwas, das man schon immer gemacht, im größeren Maßstab zu machen, sondern etabliert etwas Neues“, betont Markus Oberthaler: „Die geschaffenen Verbindungen zwischen den Fakultäten werden unser Umfeld weiter prägen.“

Exzellenzcluster Structures

Beteiligte Institutionen:

Universität Heidelberg,
MPI für Kernphysik (MPIK),
MPI für Astronomie (MPIA),
Heidelberger Institut für
Theoretische Studien (HITS)

Sprecher:

Prof. Dr. Manfred Salmhofer
(Institut für Theoretische
Physik)
Prof. Dr. Anna Marciniak-
Czochra (Institut für Angewandte Mathematik)
Prof. Dr. Markus Oberthaler (Kirchhoff-Institut für Physik)

Forschungsfelder (Comprehensive Projects, CP)

CP1: Cosmic Structure Formation
CP2: From Dust to Planets
CP3: From Molecules to Cells and Tissue
CP4: Quantum Structure and Dynamics
CP5: Quantum Systems and Neural Networks
CP6: Networks and Machine Learning
CP7: Quantum Geometry and Topological Methods in Physics

