Teilprojekt C3

2.1 Teilprojekt C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer Systeme mittels Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Professur für Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik
Institut für Physik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Telefon: (0371) 531-3212
Fax: (0371) 531-3233
e-mail: hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. K. H. Hoffmann, Computerphysik
Dr. P. Blaudeck, Computerphysik
Dr. A. Franz, Computerphysik
Dr. C. Schulzky, Computerphysik
Dr. P. Späth, Computerphysik
Dipl.-Phys. J. Burzler, Computerphysik
Dipl.-Phys. S. Seeger, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Das Projekt befasst sich mit der thermischen Relaxation in komplexen Systemen [Pal82, H99]. Komplexe Systeme sind dabei durch einen Zustandsraum charakterisiert, in dem viele energetische Barrieren die lokalen Minima der Energiefunktionen trennen. Die Bewegung im Zustandsraum wird zum einen durch diese Barrieren und zum anderen durch die Konnektivität der Zustände beschränkt. Diese beiden Phänomene zusammen bestimmen dann das Relaxationsverhalten komplexer Systeme, das als thermisches Hüpfen zwischen den Zuständen beschrieben wird. Die Zeitskalen, auf denen solche Prozesse ablaufen, können sehr groß sein, verglichen mit den typischen für experimentelle Untersuchungen verwandten Zeiten. Dies führt zu einer Vielzahl interessanter experimenteller Befunde, insbesondere beobachtet man Nichtgleichgewichtsphänomene, die sich z. B. bei den Spin-Gläsern durch das sogenannte Aging-Verhalten ausdrücken [LSNB83, GSN+88, SGN+87, HLO+92].

Ziel dieses Teilprojektes ist es, diese Nichtgleichgewichtsphänomene auf der Basis komplexer Zustandsräume zu verstehen und zu modellieren. Wegen der sehr großen

Anzahl von Zuständen kann eine erfolgreiche Modellierung in der Regel nicht in dem ursprünglichen Zustandsraum erfolgen, stattdessen hat es sich als sinnvoll erwiesen, den Zustandsraum zu vergröbern (coarse graining) und so die Anzahl der Zustände deutlich zu verringern.

In der ersten Förderungsperiode hatten wir uns insbesondere mit Relaxationseigenschaften befasst, die aufgrund von Energiebarrieren im Zustandsraum zustande kamen. Bei der Modellierung von Aging-Phänomenen in sogenannten Temperature-Step-Experimenten [VHO91, GSN$^+$88, LHOV94, HSS97] zeigte sich allerdings, dass die Berücksichtigung von kinetischen Faktoren notwendig war, die in vergröberter Weise die Konnektivitäten im Zustandsraum wiedergeben. Dies hat unser Augenmerk insbesondere auf diesen zweiten Aspekt der Relaxation in komplexen Räumen gelenkt, der von Energiebarrieren unabhängig ist.

Um die durch die Konnektivitäten bedingten Relaxationseigenschaften besser zu verstehen, haben wir uns daher entschlossen, zunächst die Relaxation in selbstähnlichen Strukturen zu untersuchen, bei denen die Relaxation nicht durch die Energielandschaft, sondern ausschließlich durch die Topologie des Zustandsraumes bestimmt ist. Hier boten Fraktale [Man77, HBA87, BG90] einen ausgezeichneten Ansatzpunkt. Mit der Gewinnung von Frau Dr. Franz erhielten wir eine ausgezeichnete Mitarbeiterin, die sich schon zuvor mit der Diffusion auf Fraktalen beschäftigt hatte.

Komplexe Energielandschaften treten nun aber nicht nur bei Spin-Gläsern auf, sondern auch bei anderen Systemen, wie etwa der Protein-Faltung [EB99, DRP98, DS90], bei der Cluster-Bildung [Ber94] oder aber auch bei anderen Systemen [BBBP99], die durch kontinuierliche Variablen gekennzeichnet sind. Bei dem von uns im Dezember 2000 veranstalteten Workshop zum Thema Energielandschaften zeigten sowohl die Arbeiten von David Wales als auch die von Christian Schön, dass viele der von uns entwickelten Vorstellungen, insbesondere die Modellierung vergröberter Zustandsräume durch Baummodelle, auch für kontinuierliche Systeme anwendbar sind.

Daher erschien es uns angezeigt, bei der Strukturbestimmung von Zustandsräumen neben den diskreten Zustandsräumen von Spin-Gläsern auch die Untersuchung von Zustandsräumen kontinuierlicher Systeme einzubeziehen.

Die insgesamt durchgeführten Arbeiten lassen sich in die Bearbeitung der folgenden Teilaufgaben untergliedern:

- Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser,
- Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme,
- Relaxationsverhalten auf Fraktalen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser

Die Zustandsraumstruktur komplexer Systeme ist Gegenstand intensiver Untersuchungen. Im allgemeinen geht man dabei vom Bild einer „Gebirgsstruktur" der Energiefunktion aus. Diese zu analysieren ist Gegenstand einer Reihe von Arbeiten von Sibani et al. [SSSA93, SS94, Sib98], Klotz und Kobe [KK94a, KK94b] und uns.

Schon in der ersten Bewilligungsperiode untersuchten wir die Zustandsraumstruktur eines kubischen Ising-Spinglases mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Dabei wurden die Wechselwirkungskonstanten gleichverteilt gewählt, da dadurch gegenüber dem in den Kobeschen Arbeiten [KK94a, KK94b] verwendeten $\pm I$–Modell die Entartungen in den Wechselwirkungstermen fortfallen, und so eine glattere Energiefunktion entsteht. Mittels eines rekursiven, speziell dem Problem angepassten und parallelisierten Branch-and-Bound Algorithmusses ermittelten wir die Zustandsraumstruktur der energetisch tief liegenden Zustände. Dadurch sind in einem gewissen Energieinterval oberhalb eines Energieminimums alle Zustände bekannt.

Zur Vergröberung des Zustandsraumes hatten wir ein Clusterverfahren entwickelt, bei dem bestimmte Mengen von (mikroskopischen) Zuständen im Zustandsraum unter Vernachlässigung der inneren Struktur des Clusters zu vergröberten Zuständen (Clustern) zusammengefasst wurden. Der von uns im Rahmen dieses Teilprojektes entwickelte Algorithmus, der Cluster ohne innere Energiebarrieren erzeugt, wird ausführlich in [KSH98] beschrieben.

Die offene Frage war nun, ob die so erhaltenen Cluster eine gute Basis für die Modellierung der Dynamik der Relaxation sind. Hierzu mußte neben der Zustandsraumstruktur auch die Dynamik des Systems vergröbert werden, d.h. die effektiven Übergangsraten zwischen den Clustern mußten aus der mikroskopischen Dynamik bestimmt werden. Dabei standen verschiedene Möglichkeiten einer Modellierung zur Auswahl. Durch die Überprüfung, ob und inwieweit die ursprüngliche Struktur in ihrer Dynamik mit der vergröberten übereinstimmt, war dann die Qualität der verschiedene Modelle zu überprüfen.

2.3.2 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme

Bei der Untersuchung und Modellierung der Zustandsraumstruktur von kontinuierlichen Systemen treten zwar ähnliche Probleme auf wie bei den diskreten Systemen (etwa Spin Systeme), trotzdem unterscheiden sich die Methoden, mit denen man die Zustandsraumstruktur kontinuierlicher Systeme bestimmen kann, ganz erheblich von denen für diskrete Systeme. Während für letztere im Prinzip die Enumeration als Basisverfahren zur Verfügung steht, ist dies für kontinuierliche Systeme wegen des Kontinuums der Zustände ausgeschlossen.

Für kontinuierliche Systeme besteht, genau wie für diskrete Systeme, die Grundidee darin, die Bereiche des Zustandsraumes zu charakterisieren, die intern schnell relaxieren. Dabei ist natürlich zu berücksichtigen, dass auch hier eine ganze Hierarchie von Relaxationszeiten auftritt. Zunächst werden typischerweise die lokalen Minima der Energie im Zustandsraum aufgesucht. Die Einzugsbereiche (Energietäler) dieser Minima werden dann dadurch charakterisiert, dass Sattelpunkte der Enerfläche bestimmt werden, die den Pässen der Energielandschaft entsprechen [DWB90, HKQ91]. In einer vorhergehenden Arbeit, zusammen mit Berry und Kunz, hatten wir so die optimale Abkühlung eines Clustersystems untersucht, das durch Vergröberung des Zustandsraums eines Argon-19-Clusters entstanden war [KBHB98]. Hierbei wurde eine typische Stichprobe von Minima und Sattelpunkten verwendet, die seinerzeit durch sehr aufwendige Untersuchungen des Zustandsraumes bestimmt worden waren.

Für die Modellierung von dynamischen Eigenschaften, etwa von Alterungsverhalten, sind aber weniger die Kenntnis der Sattelpunkte, d.h. der Barrierenhöhen, wichtig, sondern die Verweilzeiten (Exitzeiten) in den Einzugsbereichen der Energieminima. Dies sind aggregierte Grössen, in die neben der Energie des Sattelpunktes auch kinetische Grössen (Zusammenhangsverhältnisse) eingehen.

Unser Plan war es nun, einen Algorithmus zu finden, der für kontinuierliche Systeme eine vergröberte Beschreibung auf der Basis von Verweilzeiten möglich macht und dies insbesondere unter Verwendung von Parallel-Algorithmen.

2.3.3 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Wie schon oben dargelegt, haben die Ergebnisse bisheriger Arbeiten gezeigt, dass für die Relaxation in komplexen Zustandsräumen neben der Energielandschaft auch die Nachbarschaftsstruktur (die Konnektivität) der Zustände im Zustandsraum eine wichtige Rolle spielt. Um diesen Effekt zu verstehen, wollten wir uns zunächst einmal mit Systemen beschäftigen, bei denen die Relaxation durch die Struktur des Zustandsraumes verlangsamt wird. Einen guten Startpunkt hierfür bot das Relaxationsverhalten von Diffusionsprozessen auf Fraktalen [Man77, HBA87, BG90]. Betrachtet man bei diesen die Zeitabhängigkeit des mittleren Abstandsquadrates für Random-Walker, so findet man Potenzgesetze mit einem Exponenten (Random Walk Dimension), der von dem normaler Diffusion abweicht. Die Bestimmung dieser Random Walk Dimension war in der Literatur schon für verschiedene Fraktale durchgeführt worden [DBT99]; bei dem Versuch, entsprechende Rechnungen durchzuführen, erschienen uns allerdings die dabei verwendeten Algorithmen als nicht optimal. Zu unserer Überraschung ergaben sich Diskrepanzen bei den Random Walk Dimensionen. So stellte sich uns zunächst die Aufgabe, einen möglichst effizienten und genauen Algorithmus zu entwickeln.

Zusätzlich war die Qualität unserer Algorithmen zu überprüfen. Dazu beschränkten wir uns auf die Klasse der Sierpinski-Teppiche, da wir für diese auch weitere Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension zur Verfügung hatten. Bei der Durchführung dieses Programms ergaben sich eine ganze Anzahl von interessanten Fortschritten. Auch konnten Kontakte mit einer indischen Forschergruppe durch einen Arbeitsbesuch von Frau Sujata Tarafdar, tätig am Condensed Matter Physics Zentrum der Jadavpur Universität, Calcutta, aufgebaut werden. In einer Reihe von Arbeiten konnten so neue Erkenntnisse zu Diffusionsprozessen auf fraktalen Strukturen gewonnen werden.

Literaturverzeichnis

[BBBP99] K. Binder, J. Baschnagel, C. Bennemann, and W. Paul. Monte carlo and molecular dynamics simulation of the glass transition of polymers. *J. Phys.: Condens. Matter*, 11(10A):A47, 1999.

[Ber94] R. S. Berry. Clusters - tools for studying potential surfaces and their connection to molecular-dynamics. *J. Phys. Chem.*, 98(28):6910, 1994.

[BG90] J. P. Bouchaud and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications. *Phys. Rep.*, 195:127, 1990.

[DBT99] Ruma Dasgupta, T. K. Ballabh, and S. Tarafdar. Scaling exponents for random walks on Sierpinski carpets and number of distinct sites visited: A new algorithm for infinite fractal lattices. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32(37):6503, 1999.

[DRP98] J. M. Dudek, K. Ramnarayan, and J. W. Ponter. Protein structure prediction using a combination of sequence homology and global energy minimization: Ii. energy functions. *J. Comp. Chem.*, 19(5):548, 1998.

[DS90] J. M. Dudek and H. A. Scheraga. Protein structure prediction using a combination of sequence homology and global energy minimization i. global energy minimization of surface loops. *J. Comp. Chem.*, 11(1):121, 1990.

[DWB90] H. L. Davis, D. J. Wales, and R. S. Berry. Exploring potential energy surfaces with transition-state calculation. *J. Chem. Phys.*, 92(7):4308, 1990.

[EB99] N. Elmaci and R. S. Berry. Principal coordinate analysis on a protein model. *J. Chem. Phys.*, 110(21):10606, 1999.

[GSN+88] P. Granberg, L. Sandlund, P. Norblad, P. Svedlindh, and L. Lundgren. Observation of a time-dependent spatial correlation length in a metallic spin glass. *Phys. Rev. B*, 38(10):7097, 1988.

[HBA87] Shlomo Havlin and Daniel Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695, 1987.

[HKQ91] D. Heidrich, W. Kliesch, and W. Quapp. *Properties of Chemically Interesting Potential Energy Landscapes.* Springer-Verlag, Heidelberg, 1991.

[HLO+92] J. Hamman, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach, and E. Vincent. Spin-glass dynamics – relation between theory and experiment – a beginning. *Physica A*, 185(1–4):278, 1992.

[H99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30, 1999.

[HSS97] K. H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani. Age reinitialization in hierarchical relaxation mo dels for spin-glass dynamics. *Europhys. Lett.*, 38(8):613, 1997.

[KBHB98] Ralph E. Kunz, Peter Blaudeck, Karl Heinz Hoffmann, and R. Stephen Berry. Atomic clusters and nanoscale particles: From coarse-grained dynamics to optimized annealing schedules. *J. Chem. Phys.*, 108(6):2576, 1998.

[KK94a] T. Klotz and S. Kobe. Exact low-energy landscape and relaxation phenomena in Ising spin glasses. *Acta Physica Slovaca*, 44:347, 1994.

[KK94b] T. Klotz and S. Kobe. "valley structures" in the phase space of a finite 3d ising spin glass with +or-i interactions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 27(4):L95, 1994.

[KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. Coarse graining of a spin-glass state space. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10(27):6127, 1998.

[LHOV94] F. Lefloch, J. Hammann, M. Ocio, and E. Vincent. Spin glasses in a magnetic field: phase diagram and dynamics. *Physica B*, 203:63, 1994.

[LSNB83] L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Nordblad, and P. Beckman. Dynamics of the relaxation-time spectrum in a cumn spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 51(10):911, 1983.

[Man77] B. B. Mandelbrot. *Fractals - Form, Chance and Dimension.* W. H. Freeman, San Francisco, 1977.

[Pal82] R. G. Palmer. Broken ergodicity. *Adv. Phys.*, 31(6):669, 1982.

[SGN+87] P. Svedlindh, P. Granberg, P. Nordblad, L. Lundgren, and H.S. Chen. Relaxation in spin glasses at weak magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 35(1):268, 1987.

[Sib98] P. Sibani. Local state space geometry and thermal relaxation in complex landscapes: the spin-glass case. *Physica A*, 258(3–4):249, 1998.

[SS94] P. Sibani and P. Shriver. Local phase-space structure and low-temperature dynamics of short-range ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 49(10):6667, 1994.

[SSSA93] P. Sibani, C. Schön, P. Salamon, and J.-O. Andersson. Emergent hierarchical structures in complex system dynamics. a phase space analysis of the travelling salesman problem. *Europhys. Lett.*, 22:479, 1993.

[VHO91] E. Vincent, J. Hammann, and M. Ocio. Slow dynamics in spin glasses and other complex systems. Saclay Internal Report SPEC/91-080, Centre D'Etudes de Saclay, Orme des Merisiers, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France, October 1991. also in *Recent Progress in Random Magnets*, D.H. Ryan editor.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser

Bereits am Ende der vorhergehenden Berichtsperiode wurde begonnen, für ein Ising-Spinglas mit über 10^{19} Zuständen eine Vereinfachung des Zustandsraummodelles durchzuführen [KSH98]. Die in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnisse sind gegen Ende der vorherigen Bewilligungsperiode entstanden, und waren daher nicht im letzten Arbeitsbericht enthalten.

Die grundlegende Idee, die eine Vergröberung des Zustandsraums auch für eine dynamische Beschreibung möglich macht, ist die folgende [H99]: Bereiche des Zustandsraums, die nicht durch Energiebarrieren getrennt sind, werden sich schneller in ein lokales thermisches Gleichgewicht entwickeln können als solche, bei denen erst angeregt durch thermische Fluktuationen eine Energiebarriere zu überwinden ist. Bereiche, die schnell in ein internes Gleichgewicht kommen, sind dann gute Kandidaten für eine Clusterung. Darum muß der Vergröberungsalgorithmus dafür sorgen, daß innerhalb eines Clusters möglichst keine oder wenn, dann nur geringe, Energiebarrieren zu überwinden sind.

Wir entwickelten daher eine Clusterung, die keine Energiebarrieren innerhalb eines Clusters zuläßt. In Abbildung 2.1 ist das Resultat des zu diesem Zweck entwickelten Algorithmus anhand eines Modellsystems von nur 28 Zuständen dargestellt.

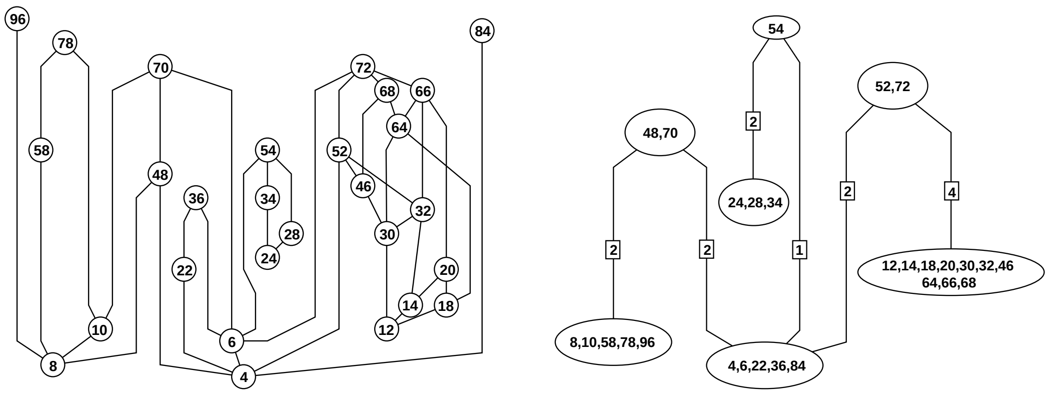

Abbildung 2.1: Links: Mikroskopische Zustände. Rechts: Vergröberter Zustandsraum. Die Zahlen in den Rechtecken stellen die jeweilige Anzahl der mikroskopischen Verbindungen dar.

Im Hinblick auf eine Qualitätskontrolle führten wir Vergleiche der Modellierungen auf der Ebene einer Mastergleichungsdynamik durch.

Für die nunmehr bekannte Topologie eines vergröberten Zustandsraumes ermittelten wir vergröberte Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Clustern. Eine gute Approximation konnte erreicht werden, indem zunächst alle vorkommenden Energien innerhalb eines Clusters von Zuständen durch eine (Modell A) oder zwei (Modell B) Energien repräsentiert werden. Im Fall A wird die mittlere Energie der Zustände im Cluster als Energie des Gesamtzustandes benutzt. Im Fall B gibt es mehrere Möglichkeiten der Bestimmung der beiden repräsentativen Energien. In unserem Fall hat es sich bewährt, die niedrigste Energie eines Mikrozustandes als das niedrigere und die mittlere Energie aller anderen Mikrozustände als das höhere Energieniveau im Modell B zu wählen.

Anschließend wurden mikroskopische und vergröberte Übergangsraten verglichen und die Parameter des vergröberten Modells so angepaßt, daß die Übergangsraten für wenigstens zwei wichtige Punkte auf der Temperaturskala (z.B. $T \rightarrow 0$ und $T \rightarrow \infty$) übereinstimmen. Mit diesem Verfahren gelang es, eine Dynamik zu modellieren, die unter Benutzung des wesentlich einfacher zu berechnenden vergröberten Modells eine gute Näherung darstellt. Wie aus einem Vergleich der Dichte der Relaxationsmoden als Funktion der Relaxationszeit hervorgeht, Abbildung 2.2, gilt diese Aussage insbesondere für Modell B und für die langsamen Relaxationsmoden des Gesamtsystems über einen großen Temperaturbereich.

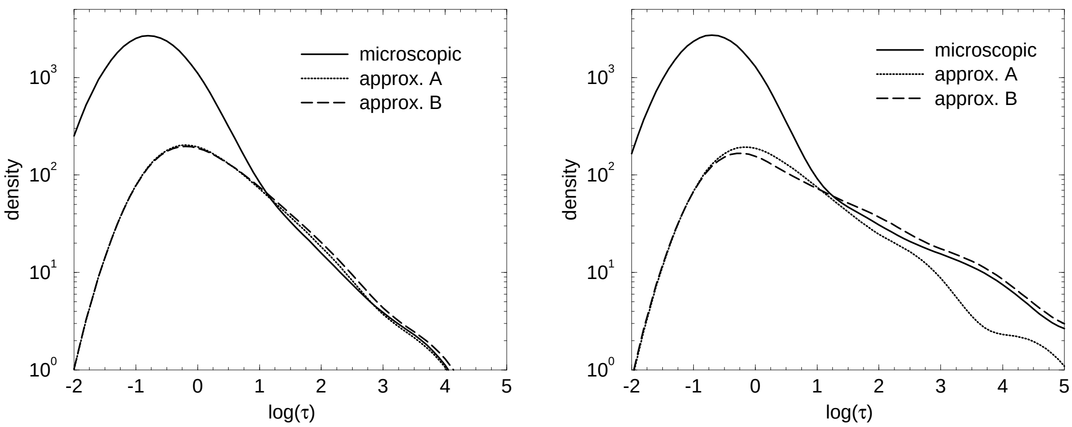

Abbildung 2.2: Geglättete Dichte der Relaxationsmoden über dem Logarithmus der Relaxationszeit τ bei $\beta = 1/kT = 1$ (links) und $\beta = 4$ (rechts) für das mikroskopische System und die beiden Modelle A und B.

Für die höhere Temperatur liefern beide Modelle eine nahezu gleichwertige Näherung für das mikroskopische System. Jedoch nur Modell B ist auch für niedrigere Temperaturen eine ebensogute Näherung.

2.4.2 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme

Untersucht wurden Systeme von Teilchen, deren Wechselwirkungsenergie durch Modellpotentiale gegeben war. Die Ankopplung an ein Wärmebad wird durch eine molekulardynamische Beschreibung modelliert. Ziel unseres Algorithmus war es, den kontinuierliche Zustandsraum auf einem diskreten Raum abzubilden. Dazu wurde eine parallele Implementierung entwickelt, die diese Aufgabe sehr effizient erfüllt [BH01].

Zunächst wird ein Master-Prozeß gestartet, der den Konfigurationsraum durchläuft, indem die molekulare Dynamik bei einer hohen Temperatur (Gaszustand) verfolgt wird.

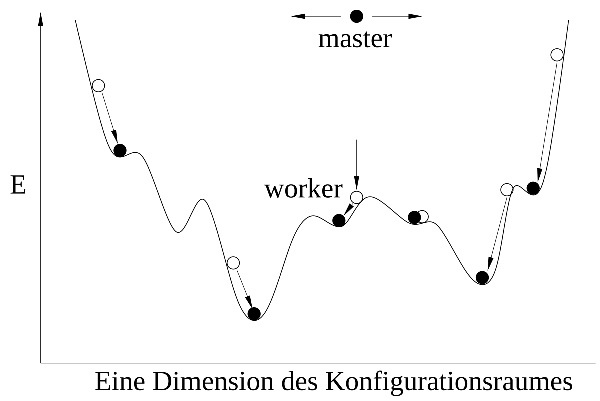

Abbildung 2.3: Ein Master Prozeß durchläuft den Konfigurationsraum bei einer genügend hohen Temperatur. Tochter-Prozesse sind für das Aufsuchen der Minima und ihrer Eigenschaften zuständig.

Dieser setzt in gewissen Zeitabständen Tochterprozesse in Gang, die für die genauere Untersuchung der lokalen Umgebung eines Punktes im Konfigurationsraum verantwortlich sind, siehe Abbildung 2.3. An dieser Stelle bot sich die Implementierung eines parallelen Algorithmus an, der zu einer annähernden Gleichverteilung der Last auf den Prozessoren führt, trotz unterschiedlicher Schwierigkeitsgrade der einzelnen Tasks für die Tochterprozesse. Das auf den Chemnitzer Linux-Clustern benutzte MPI ermöglicht dieses Vorgehen durch Aufruf eines Receive-Requests, der auf das erste Send eines beliebigen Workers wartet. Nach der Erstversorgung aller Worker mit Tochterprozessen führt der Master in geeigneten Zeitabständen zu diesem Zweck die Receive-Send-Sequenz in Abbildung 2.4 durch.

In Abbildung 2.4 ist außerdem beispielhaft die für diesen Algorithmus charakteristische Abhängigkeit der Effektivität (Zahl n der bearbeiteten Minima pro Zeiteinheit, dividiert durch die Anzahl der Prozessoren N) von der Anzahl der Prozessoren (inclusive ein Master-Prozessor) dargestellt. Es existiert ein Optimum der Effektivität bei einer bestimmten Prozessoranzahl. Benutzt man eine zu geringe Zahl von Prozessoren als Worker, so muß der Master oft auf freie Worker warten. Bei zu großer Zahl müssen die Worker auf neue Aufgaben warten und die Gesamteffektivität $(n/t)/N$ bleibt unterhalb einer asymptotischen Funktion, die durch die Leistung des Master bestimmt wird. Hat man sehr viele Prozessoren zur Verfügung, ist es folglich unter Umständen besser, mehr als einen Master-Prozeß zu starten. Das optimale Verhältnis $N_{\text{Worker}}/N_{\text{Master}}$ hängt natürlich von den Umständen des Einzelfalles ab. Es ist insbesondere abhängig von der mittleren Zeit, die ein Worker für die Analyse eines Minimums benötigt. Bei unseren praktischen Berechnungen wurden bisher zwischen 10 und 72 Worker pro Master eingesetzt.

Die Tochterprozesse suchen zunächst die Lage des jeweils nächstliegenden wesentlichen Minimums der potentiellen Energie. Anschließend wird, ausgehend vom Zustand im Potentialminimum, das System durch erneute Kalibrierung auf eine festgelegte Temperatur dazu gebracht, dieses Minimum wieder zu verlassen. Die dazu erforderliche Zeit (Verweilzeit) wird gemessen und über der Energie des Minimums, das verlassen wurde, aufgetragen.

```
...
########## Neuer Job fuer arbeitslosen Worker
########## Empfang einer Antwort von beliebigem Worker
#          mit der Nummer isender
call MPI_RECV(e0, 3, MPI_REAL, MPI_ANY_SOURCE,
              anstype, MPI_COMM_WORLD, status, ierr)
isender = status(MPI_SOURCE)
########## Senden des neuen Jobs an Worker isender
call MPI_SEND(x, n3, MPI_REAL, isender,
              reqtype, MPI_COMM_WORLD, ierr)
########## Verarbeitung des Resultats von isender
...
```

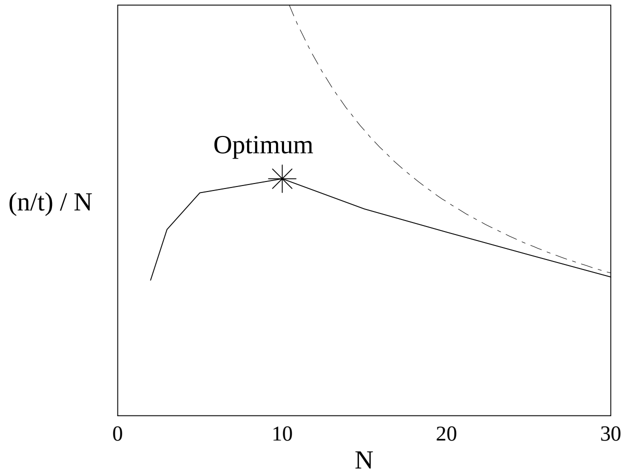

Abbildung 2.4: Master–Worker–Wechselwirkung und Zahl der bearbeiteten Minima pro Zeiteinheit und Prozessor als Funktion der Zahl der Prozessoren. Strichpunktlinie: Asymptotische Effektivität für einen Master-Prozess.

Die so gewonnenen Daten können nun weiterverarbeitet werden. In Abbildung 2.5 wurden beispielsweise eine jeweils gleiche Zahl von Minimumsenergien gemittelt und so die durch senkrechte Striche dargestellte repräsentative Auswahl von Energien E_j gewonnen. Desweiteren kann, wie im Bild als Linie dargestellt, durch Regression eine Funktion bestimmt werden, die einen Mittelwert der Verweilzeit $\overline{t_j^{esc}}$ in Abhängigkeit von der Energie des Minimums repräsentiert.

Führt man nunmehr dieselbe Prozedur der Sammlung und Auswertung von Daten für verschiedene Temperaturen durch, dann gelingt es anschließend, für jedes repräsentative Minimum mit der Energie E_j die Temperaturabhängigkeit der mittleren Verweilzeit und damit der Entkommwahrscheinlichkeit λ_j durch einen Boltzmann-Faktor zu approximieren, der eine zu jedem Minimum gehörende charakteristische zu überwindende Potentialhöhe ΔE_j enthält

$$\lambda_j(T) = \frac{1}{\overline{t_j^{esc}}(T)} = C \exp(-\frac{\Delta E_j}{kT})\,. \tag{2.1}$$

Mit diesen Daten kann nun der ursprünglich kontinuierliche Raum auf eine verzweigte baumartige Topologie abgebildet werden. Bereits eine sehr grobe erste Approximation mit Übergangswahrscheinlichkeiten, die proportional zu den λ_j des

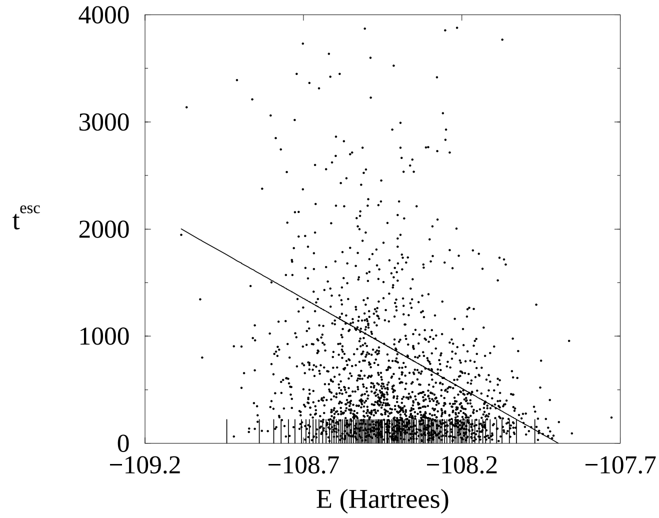

Abbildung 2.5: Jeder Punkt stellt die Zeit für das Verlassen einen Potentialminimums bei $T = 4000$ K in Abhängigkeit von der Energie dieses Minimums dar. Zeiteinheit ist 80 a.u. $\approx 2{*}10^{-15}$ s.

Startzustandes gewählt wurden, führte zu guten Resultaten bei der Verwendung dieses Modells für die stochastische Optimierung von realistischen Halbleiterclustern.

2.4.3 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Frage, inwieweit das Relaxationsverhalten in komplexen Systemen durch die Konnektivitäten im Zustandaraum bestimmt ist, steht im Mittelpunkt dieser Arbeiten. Diese Frage läßt sich besonders gut am Beispiel von Diffusionsprozessen auf fraktalen Strukturen studieren.

Fraktale können durch die Angabe mehrerer Parameter charakterisiert werden. Besondere Rollen spielen hierbei die fraktale Dimension d_f der Struktur, die direkt aus der Geometrie bestimmt werden kann, und die Random-Walk-Dimension d_w, die die zeitliche Entwicklung von Relaxations- und Diffusionsprozessen beschreibt. Im Vergleich zu d_f ist d_w sehr stark von der Nachbarschaftsstruktur geprägt und ist deshalb für eine gutes Verständnis des Relaxationsverhaltens auch im vergröberten Zustandsraum von grosser Bedeutung.

In vorbereitenden Arbeiten wurden daher zunächst verschiedene Algorithmen zur Modellierung von Diffusionsprozessen auf Sierpinski-Teppichen (siehe Abbildung 2.6) entwickelt.

In [SFSH01] wird ein neuartiger Algorithmus vorgestellt, der eine effiziente Simulation von Random-Walks auf sogenannten "finitely ramified" Sierpinski-Teppichen erlaubt. Diese deterministischen Fraktale sind dadurch gekennzeichnet, daß nur maximal vier Randpunkte des Generators in der iterierten Struktur zu Verbindungen führen können. Im Gegensatz zu herkömmlichen Algorithmen, die eine "Karte" der n-ten Iteration des Generators benutzen, um Nachbarschaftsrelationen bestim-

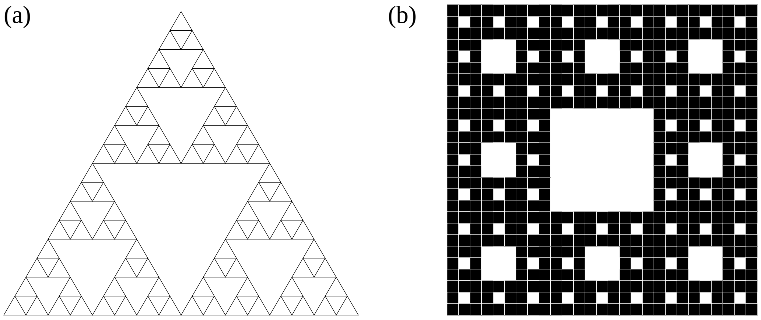

Abbildung 2.6: Das SIERPINSKI-Dreieck und der typische SIERPINSKI-Teppich.

men zu können, werden diese in unserem Algorithmus zu Beginn der Simulation in vergleichsweise kleinen Tabellen abgelegt. In Verbindung mit einer hierarchischen Notation (siehe Abbildung 2.7) der Koordinaten des Random-Walkers führt dies zu einem Programm mit sehr niedrigem Speicherbedarf, der besonders auf moderneren Rechnerarchitekturen effiziente Simulationen erlaubt (siehe Tabelle 2.1).

	Pentium/166	PentiumPro/200	PentiumII/400
unser Algorithmus	86.40s	25.91s	10.12s
Dasgupta et al.	562.08s	207.03s	98.29s
Verhältnis	6.5	8.0	9.7

Tabelle 2.1: Ausführungszeiten der Algorithmen zur Simulation von Random-Walks auf Fraktalen auf verschiedenen CPUs. Der Algorithmus ist effizienter auf moderneren CPUs, da Optimierungen (Sprungvorhersage, Pipelining) besser ausgenutzt werden können.

Im Gegensatz zu Algorithmen, die auf o.g. Karten basieren, treten hier auch keine Randeffekte auf. Dies erlaubte uns Simulationen verschiedener Strukturen mit jeweils $10,000$ Schritten pro Walker (der oberen Grenze in bisherigen Arbeiten) und Mittelungen über $10,000,000$ anstatt bisher $70,000$ Walker [DBT99] und aus den Daten dieser Simulationen die Bestimmung der Random-Walk Dimensionen. Die Ergebnisse zeigen qualitativ das gleiche Verhalten wie in den Arbeiten von Dasgupta et al., allerdings fanden wir eine sehr viel größere Variation der Exponenten von Teppich zu Teppich.

In weiterführenden Arbeiten wurden dann Untersuchungen der selben Strukturen mit der "Exact Numeration Method" [HBA87] durchgeführt. Basierend auf einer Iteration der Mastergleichung besteht das Problem bisheriger Untersuchungen vor allem darin, daß zu jedem Punkt des Fraktals eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit gespeichert werden muß. Erfolgt dies in einem Schema nach o.g. Karten, wird zum einen Speicher nicht genutzt und zum anderen erfolgt bereits durch Wahl der Kartengröße eine Beschränkung der Zeit, bis zu der eine Simulation ohne Randeffekte möglich ist.

Unser in [FSSH00b] vorgestellter Algorithmus umgeht diese Nachteile, indem eine dynamische Datenstruktur zur Speicherung der Wahrscheinlichkeitswerte benutzt wird. So kann die gesamte Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Zeit t bestimmt werden, die wesentlich mehr Information enthält als nur das mittle-

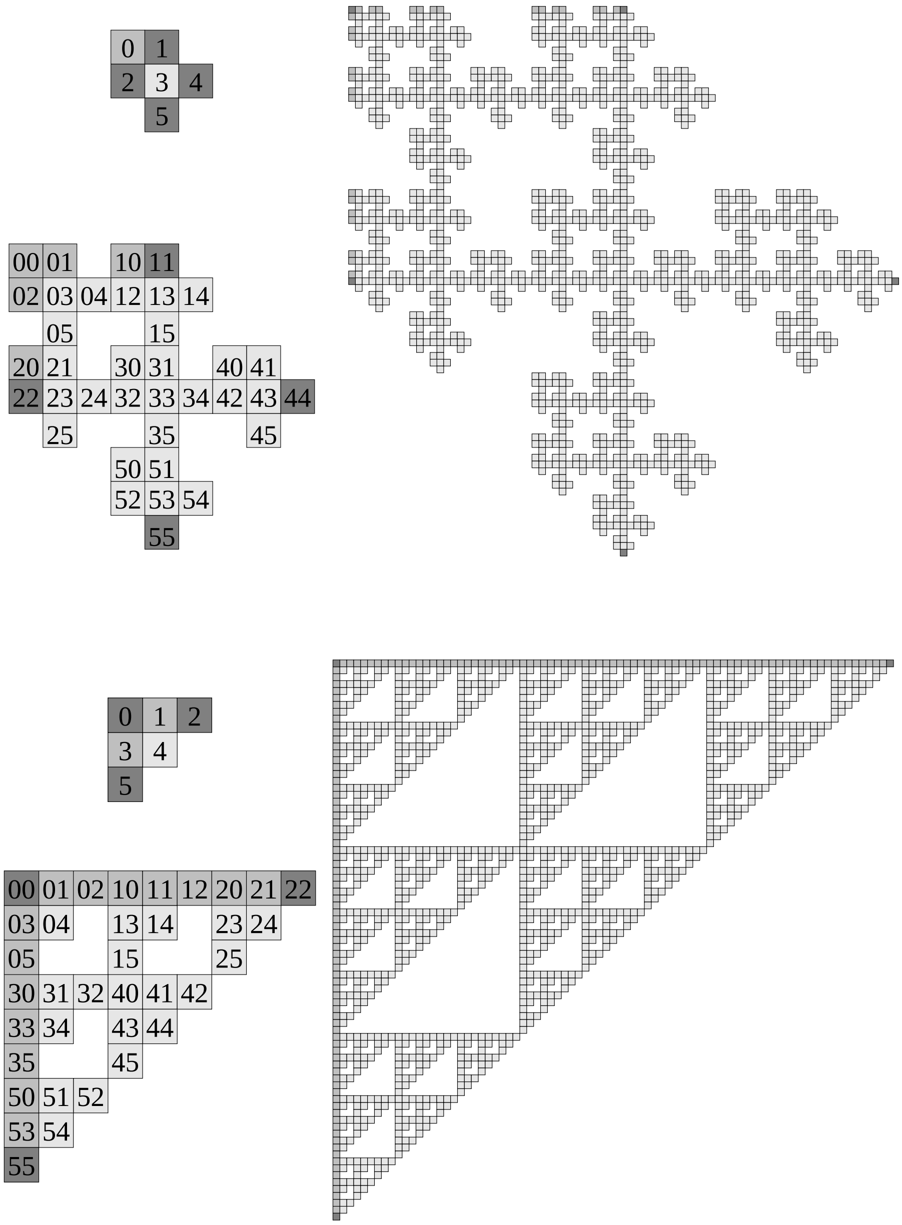

Abbildung 2.7: Die ersten Iterationen für Generatoren mit vier Kontaktpunkten (dunkel), einem nicht-verbindenden Oberflächenpunkt (mittel) und einem inneren Punkt (links) bzw. drei Kontaktpunkten, zwei nicht-verbindenden Oberflächenpunkten und einem inneren Punkt. Für die erste und zweite Iteration sind Beispiele der Positionsangaben gegeben.

re Abstandsquadrat $\langle r^2(t) \rangle$. Diese dynamische Datenstruktur benötigt nur wenig mehr Speicherplatz als für die Punkte mit nicht verschwindender Aufenthaltswahrscheinlichkeit zum Zeitschritt t notwendig ist.

Durch die Verwendung von Nachbarschaftstabellen wird auch hier eine erhebliche Beschleunigung der Algorithmen erreicht, so daß nur die verfügbare Rechenleistung und der vorhandene Speicherausbau eine echte Beschränkung darstellen. Simulationen zu den bereits mit dem Random-Walk Algorithmus untersuchten SIERPINSKI-Teppichen zeigten wieder eine größere Variation der Exponenten, die aber für einige

Strukturen wesentlich näher an den theoretischen Werten [SFH00] liegen.

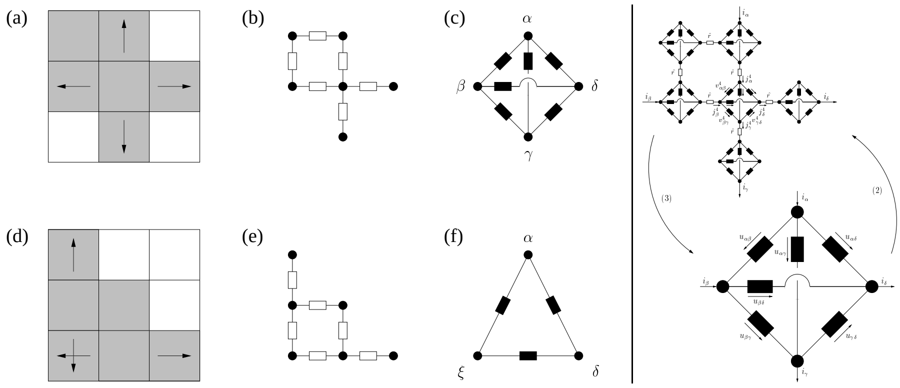

Abbildung 2.8: Übergang von Generatoren mit vier (a) und drei (d) Kontaktpunkten zu Generator-Netzwerken (b+e) und dazu equivalente rhomboidische (c) bzw. trianguläre (f) Netzwerke. Rechts eine Illustration des Iterationsschemas zur Widerstandsskalierungsmethode: (2) Die Knoten des Generator-Netzwerkes (b) werden durch den Rhomboid ersetzt. (3) Das entstehende Netzwerk wird in ein equivalentes rhomboidisches Netzwerk umgeformt.

Diese theoretischen Werte für die Random-Walk-Dimension d_w konnten in analytischen Untersuchungen [SFH00] bestimmt werden. Die theoretischen Beschreibungen basieren auf der Tatsache, daß Diffusionsprozesse, z. B. Brownsche Bewegung auf einem Substrat, und der Stromfluß durch ein geeignetes Widerstandsnetzwerk (siehe Abbildung 2.8) eng miteinander verbunden sind. Auch im dem Fall, daß das Substrat und das Widerstandsnetzwerk selbstähnliche Fraktale sind, wird die Einstein-Relation zwischen Diffusionskonstante und Leitfähigkeit benutzt und kann als Relation $d_w = d_f + \xi$ zwischen den Skalierungsexponenten für das mittlere Abstandsquadrat d_w und den Widerstand des Netzwerkes ξ sowie der fraktalen Dimension d_f formuliert werden [FSH00]. Durch Interpretation des Fraktals als Widerstandsnetzwerk und einer Skalierungsmethode konnten so mit einem MATHEMATICA Programm wesentlich genauere Werte für die Random-Walk-Dimension erhalten werden.

Diese drei von uns entwickelten Zugänge zur Charakterisierung von Diffussionsprozessen, die durch topologische Beschränkungen im Realraum begrenzt sind, erlauben die Bestimmung der Random-Walk-Dimension über stochastische Simulation, Iteration der Mastergleichung und Widerstandsskalierung, d.h. also durch direkte Simulation, statistische Beschreibung der Dynamik und theoretische Betrachtungen. In einer zusammenfassenden Arbeit [FSSH00a] wurden die Methoden hinsichtlich ihrer Eigenschaften, Vor- und Nachteile untersucht. Es zeigt sich, daß die Methode der Widerstandsskalierung die exaktesten Ergebnisse für d_w liefert. Für beide – Mastergleichung und Random-Walk – zeigt sich jedoch aus den Untersuchungen zur Widerstandsskaliernung, daß extrem große Bereiche des Teppichs "abgedeckt" werden müssten, um vergleichbare Genauigkeiten für d_w zu erreichen.

Um mögliche Ähnlichkeiten der fraktalen Strukturen mit Zustandsräumen komplexer Systeme besser charakterisieren zu können, wurden Untersuchungen zur Porenstruktur von SIERPINSKI-Teppichen durchgeführt [FSTH00]. Dazu erfolgte zunächst die Beschreibung der Poren durch ein Polynom. Ausgehend vom Generator wird dieses Polynom iterativ für jede Stufe der Generierung des Teppichs berechnet und enthält Informationen über die Verteilung von Poren mit unterschiedlichem Durchmesser und Umfang. Damit können die die Skalierung dieser Größen bestimmenden Exponenten berechnet werden. Während die Porenfläche zwei-dimensional ist, kann die Dimension des Porenumfangs mit der Random-Walk-Dimension in Zusammenhang gebracht werden.

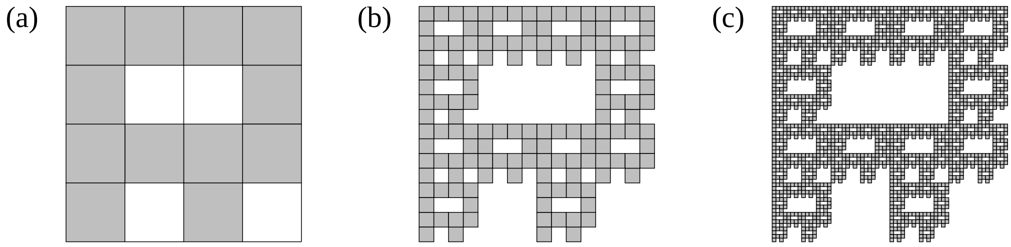

Abbildung 2.9: Beispiel für einen Generator (a) mit Poren und potentiellen Poren verschiedener Fläche, die in der zweiten (b) bzw. dritten (c) Iteration erst entstehen.

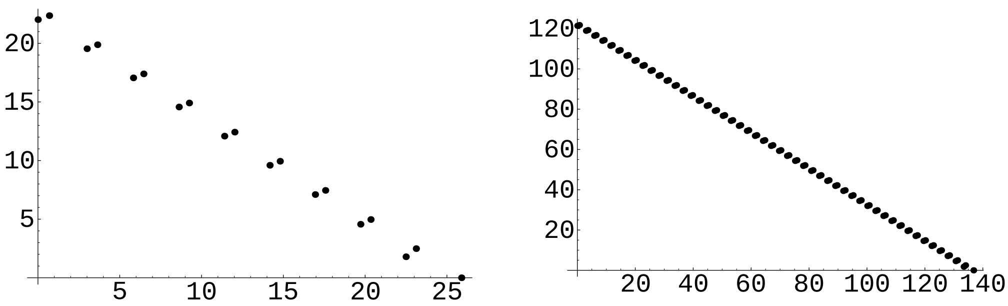

Abbildung 2.10: Doppelt-logarithmische Darstellung der Anzahl Poren über der Porenfläche für 10 (a) und 50 (b) Iterationen des Generators aus Abbildung 2.9.

Ein interessanter Aspekt dieser Arbeiten ist, dass poröse Materialien, wie z.B. Sedimentgestein, oft fraktale Eigenschaften auf bestimmten Längenskalen zeigen. Vorstufen deterministischer Fraktale, wie z.B. n-te Iterationen der Generatoren von SIERPINSKI-Teppichen, die periodisch wiederholt werden, können so durchaus als Modelle zum Studium der Diffusion in solch quasi-fraktalen Systemen herangezogen werden. Die Fragestellung, wie die makroskopische Diffusivität mit den Charakteristiken der fraktalen Strukturen in Zusammenhang gebracht werden kann, wurde in einer Zusammenarbeit mit S. Tarafdar untersucht [TFSH01]. Die Untersuchung des Diffusionsverhaltens auf "SIERPINSKI-Kristalle" für verschiedene Generatoren bestätigte zunächst den erwarteten Übergang von anomaler zu normaler Diffusion bei $\langle r^2 \rangle = R$, wobei R die Länge der Einheitszelle des Kristalls ist. Allerdings können Teppiche mit gleichem d_f und gleichem d_w durchaus verschiedene Diffusionskoeffizienten zeigen, abhängig von der Iterationsstufe des betrachteten Generators und auch von der anfänglichen anomalen Diffusionskonstante. Hier sind noch umfangreichere Studien für ein besseres Verständnis dieser Abhängigkeiten notwendig.

Ein noch immer offenes Problem ist die Kontinuumsbeschreibung von Diffusionsprozessen auf Fraktalen. Es gibt zwar einige Vorschläge [SED+00], aber aufgrund unserer sehr genauen numerischen Ergebnisse ist klar, dass es bisher keine befriedigende Beschreibung gibt. In diesem Zusammenhang haben wir eine Kooperation mit Prof. Essex (Canada), in der wir Eigenschaften von fraktionalen Diffusionsgleichungen untersuchen [HES98, ESFH00].

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Publikationen

[DESF01] M. Davison, C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K.H. Hoffmann. Clouds, Fibres and Echoes: a New Approach to Studying Random Walks on Fractals. accepted by *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2001.

[ESFH00] C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K.H. Hoffmann. Tsallis and Rényi entropies in fractional diffusion and entropy production. *Physica A*, 284(1-4):299, 2000.

[FSSH00b] A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger, and K. H. Hoffmann. An efficient implementation of the exact enumeration method for random walks on Sierpinski carpets. *Fractals*, 8(2):155, 2000.

[HES98] K. H. Hoffmann, C. Essex, and C. Schulzky. Fractional diffusion and entropy production. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 23:166, 1998.

[H99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30, 1999.

[KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. Coarse graining of a spin-glass state space. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10(27):6127, 1998.

[SFSH01] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets. *Comp. Phys. Comm.*, 134(3):307, 2001.

[TFSH01] S. Tarafdar, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Modelling porous structures by repeated sierpinski carpets. *Physica A*, 292(1-4):1, 2001.

[SED+00] S. Schulzky, C. Essex, M. Davison, A. Franz, and K. H. Hoffmann. The similarity group and anomalous diffusion equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 33(31):5501, 2000.

[SFH00] Christian Schulzky, Astrid Franz, and Karl Heinz Hoffmann. Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified Sierpinski carpets. Accepted for publication in *SIGSAM Bulletin*, 2000.

Zur Publikation eingereicht oder in Vorbereitung:

[BH01] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Estimating energy landscape properties of amorphous systems. preprint, 2001.

[FSH00] Astrid Franz, Christian Schulzky, and Karl Heinz Hoffmann. The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets. Submitted to *Nonlinearity*, 2000.

[FSSH00a] Astrid Franz, Christian Schulzky, Steffen Seeger, and Karl Heinz Hoffmann. Diffusion on fractals – efficient algorithms to compute the random walk dimension. preprint, 2001.

[FSTH00] Astrid Franz, Christian Schulzky, Sujata Tarafdar, and Karl Heinz Hoffmann. The pore structure of Sierpinski carpets. Submitted to *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2000.

Andere Zitate: Siehe auch Literaturverzeichnis zu 2.3

[HBA87] Shlomo Havlin and Daniel Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695, 1987.

[DBT99] Ruma Dasgupta, T. K. Ballabh, and S. Tarafdar. Scaling exponents for random walks on Sierpinski carpets and number of distinct sites visited: A new algorithm for infinite fractal lattices. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32(37):6503, 1999.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Bei der Relaxation komplexer Systeme gibt es – wie schon oben angedeutet – eine ganze Reihe offener Fragen:

Im Bereich der Zustandsraumuntersuchungen an Spingläsern ist zwar der Bereich um einzelne Energieminima herum untersucht, aber es stellt sich heraus, dass für die Frage einer gröberen Clusterung die bisher erzielte Enumeration der Zustände nicht ausreicht. Aufgrund größerer Rechnerresourcen sollte dies bald möglich werden, und es stellen sich dann Fragen wie:

- Wie sieht die Verbindung zwischen den Energietälern nah beieinanderliegender Minima aus?
- Kann eine Clusterung implementiert werden, die Energiebarrieren unterhalb einer gewissen Größe unberücksichtigt läßt?

Bei der Untersuchung der Zustandsräume kontinuierlicher Systeme gibt es ebenfalls naheliegende Ansatzpunkte für eine Verbesserung:

- Kann die Modellierung durch eine feinere Kategorisierung der Verweilzeiten, etwa nach weiteren Systemeigenschaften, zu einer Reduktion in der Varianz dieser Zeiten führen?
- Wie sieht eine hierarchische Struktur der Energieminima und -täler für die von uns untersuchten Systeme aus?

Und schließlich ergeben sich aus dem jetzigen Arbeitsstand im Bereich der Diffusion auf Fraktalen die folgenden Probleme:

- Wie sieht eine korrekte Kontinuumsbeschreibung für die Diffusion aus?
- Was passiert, wenn man die fraktale Struktur zusätzlich mit einer Energiefunktion versieht?
- Wie sieht das Wechselspiel zwischen Konnektivitäten und Überwindung von Energiebarrieren aus?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Vorhaben ist im Finanzierungsantrag 2002–2004, Teilprojekt C3, enthalten.