

Teilprojekt

C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer
Systeme mittels Parallelrechnern

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

Dipl.-Phys. A. Fischer, Computerphysik

Dr. A. Franz, Computerphysik

Dipl.-Phys. F. Heilmann, Computerphysik

Dipl.-Phys. A. Nemnes, Computerphysik

Dr. S. Schubert, Computerphysik

Dr. C. Schulzky, Computerphysik

Dr. S. Seeger, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Das Projekt befasst sich mit dem Relaxationsverhalten komplexer Systeme [Pal82, Hof99]. Diese sind durch einen Zustandsraum charakterisiert, der viele lokale Minima der Energiefunktion enthält, die ihrerseits durch energetische Barrieren unterschiedlicher Höhe getrennt sind. Zudem wird die Bewegung im Zustandsraum nicht nur durch diese energetischen Barrieren, sondern auch durch die Konnektivität der Zustände und damit durch die Mobilität zwischen verschiedenen Zustandsraumbereichen beschränkt.

Diese Einflüsse bestimmen das thermische Relaxationsverhalten der komplexen Systeme, welches als Hüpfen zwischen den Zuständen beschrieben werden kann. Die Zeitskalen, auf denen solche Prozesse ablaufen, sind sehr groß verglichen mit den typischen, für experimentelle Untersuchungen verwandten Zeiten. Dies führt zu einer Vielzahl interessanter experimenteller Befunde; insbesondere werden Nichtgleichgewichtsphänomene beobachtet. In Spin-Gläsern drücken sich diese besonders durch das so genannte Aging-Verhalten aus [LSNB83, GSN⁺88, SGN⁺87, HLO⁺92, VHO⁺97, JVH⁺98, MJN⁺02, JYN02].

Ziel dieses Teilprojektes ist es, u. a. diese Nichtgleichgewichtsphänomene auf der Basis komplexer Zustandsräume zu modellieren. Wegen der extrem hohen Anzahl von

Zuständen selbst relativ kleiner Systeme kann eine erfolgreiche Modellierung in der Regel nicht im vollständigen Zustandsraum erfolgen. Statt dessen hat es sich als fruchtbar erwiesen, diesen auf eine handhabbare Anzahl sogenannter Cluster zu vergrößern. Dies sind Zusammenfassungen sehr vieler energetisch dicht beieinander liegender benachbarter Zustände, die untereinander schnell ins Gleichgewicht kommen.

Bei der Modellierung von Aging-Phänomenen in sogenannten Temperature-Step-Experimenten [VHO91, GSN⁺88, LHOV94, HSS97] zeigte es sich, dass die Berücksichtigung von kinetischen Faktoren notwendig ist, die in vergrößerter Weise die Konnektivitäten im Zustandsraum wiedergeben. Um die durch die Konnektivitäten bedingten Relaxationseigenschaften besser modellieren zu können, haben wir unsere Forschungen zur Relaxation in selbstähnlichen, fraktalen Strukturen vertieft. Bei diesen ist die Relaxation nicht durch die Energielandschaft, sondern ausschließlich durch die Topologie des Zustandsraumes bestimmt.

Basierend auf einer schon früher entwickelten Beschreibung von Fraktalen, die eine effektiv randlose Simulation der Diffusion von Zufallswanderern möglich macht, implementierten wir nun eine parallelisierte Variante, die die Grundlage des Langzeitstudiums der Diffusion auf Fraktalen bildet. So konnten wir die anomalen Diffusioneigenschaften sehr genau charakterisieren.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation bei Spingläsern und anderen Systemen

Die Struktur des Zustandsraums komplexer Systeme bildet die Basis für die dynamische Beschreibung solcher Systeme. Dabei wird der Zustandsraum häufig durch ein Energiegebirge visualisiert [Hof02, HS02]. Diese Zustandsraumstruktur für ausgewählte, physikalisch relevante Modellsysteme wie Ising-Spins zu analysieren, war zentrales Ziel unserer Untersuchungen, da sie in Verbindung mit weiteren Einflüssen Ursache einer Reihe von thermodynamischen Nichtgleichgewichtsphänomenen ist.

Die in den vorhergehenden Bewilligungsperioden begonnenen Arbeiten zur Zustandsraumstruktur von Ising-Spingläsern wurden fortgesetzt. Dabei wurden insbesondere Spingläser mit gleichverteilten Wechselwirkungen benutzt. Ziel unserer Untersuchungen war die Charakterisierung durch Enumeration im niedrigerenergetischen Bereich und die Gewinnung von Zustandsdichten auch für höhere Energien sowie die Frage einer angemessenen Vergrößerung zur Beschreibung der Dynamik.

Wichtiges Teilziel war dabei, den Zugriff auf die globale Zustandsdichte komplexer Systeme zu verbessern. Unbekannt ist z. B. die genaue Energieabhängigkeit in Spingläsern mit verschiedenen Wechselwirkungen. Hierzu entwickelten wir einen parallelen Algorithmus, der die Übergangsmatrix eines Systems sukzessive approximiert. Unsere Implementation ist besonders gut für Rechner-Cluster geeignet.

Mittels eines rekursiven, speziell dem Problem angepassten Branch-and-Bound-Verfahrens, das in dieser Antragsperiode weiter optimiert wurde, katalogisierten wir die niedrigerenergetischen Teile des Zustandsraums und ermittelten so seine Struktur. Insbesondere bei unseren Forschungen zur Vergrößerung von Zustandsräumen konnten auf diese Weise realistischere Bilder der Konnektivitäten und Energieabhängigkeiten gezeichnet werden.

Bei der Vergrößerung von Zustandsräumen treten eine ganze Reihe von Problemen auf, da hierbei einerseits Effizienz (starke Reduktion der Freiheitsgrade), andererseits aber Wirkungsgleichheit (im dynamischen Verhalten) einander widersprechende Forderungen sind. Als Basis hierzu konnten wir mit Hilfe der neu gewonnenen Daten die Barrierenstruktur von Spingläsern charakterisieren und Aussagen zur Verteilung lokaler Minima treffen. Dies versetzte uns dann in die Lage, eine automatische Vergrößerung des Zustandsraums zu implementieren. Hierbei ergaben sich eine Reihe interessanter Erkenntnisse, die insbesondere zu verbesserten Modellen komplexer Zustandsräume führen werden.

Zur Ergänzung studierten wir auch den Zustandsraum kontinuierlicher Systeme. Bei der Analyse des Zustandsraumes solcher Systeme besteht die Grundidee darin, die Bereiche des Zustandsraumes zu definieren, die intern so schnell relaxieren, dass sie als ein diskreter Zustand in einem möglichst einfachen System solcher diskreter Zustände behandelt werden können. 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 Energiefläche bestimmt werden, die den Pässen der Energielandschaft entsprechen [DWB90, HKQ91]. In einer vorhergehenden Arbeit hatten wir so die optimale Abkühlung eines Clustersystems untersucht, das durch Vergrößerung des Zustandsraums eines Argon-19-Clusters entstanden war [KBHB98].

Befindet sich das System in einem solchen Minimum, dann kann sein Verhalten in Abhängigkeit von der Temperatur weiter untersucht werden. Dadurch gelingt es erstens, die Höhen der Barrieren für den Übergang zu Nachbarzuständen zu „messen“. Die für diesen Übergang benötigte mittlere Zeit charakterisiert aber außerdem auch eine von kinetische Größen und Zusammenhangsverhältnissen abhängige Übergangswahrscheinlichkeit. Unter Benutzung dieser Daten kann nun die Dynamik des Systems modelliert werden. Ziel unserer Untersuchungen war es, unter Verwendung der schon entwickelten Programme diese Fragen für amorphe Halbleiter zu analysieren.

2.3.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Dynamik eines Systems wird nicht nur durch energetische Barrieren, sondern auch von der Zusammenhgangsstruktur des Zustandsraums selbst wesentlich beeinflusst. Infolgedessen setzten wir unsere Arbeiten zur Untersuchung von Relaxationsvorgängen auf Fraktalen fort. Diese dienen einerseits als Zustandsraummodell eines komplexen Systems, andererseits als Realraummodell z. B. poröser Materialien. Die besondere Art von Konnektivität zwischen den Zuständen verlangsamt i. Allg. die Bewegung von Zufallswanderern bzw. die Diffusion von Teilchen.

Im Mittelpunkt unserer Untersuchungen stand die Aufgabe, diese anomale Diffusion möglichst exakt zu charakterisieren. Technisch standen wir vor der Frage, wie sich die von uns implementierten, bisher nur seriellen Algorithmen effektiv parallelisieren lassen. Um die Dynamik der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung auf verschiedenen Sierpinski-Teppichen zu berechnen, müssen effektiv randlose Fraktale verwendet werden. Dies gelang uns durch einen Algorithmus, in dem nur die schon mit Wahrscheinlichkeit belegten Teile des Fraktals gespeichert werden. Um nun Langzeitstudien durchführen zu können, muss die Beschränkung durch Speicherausbau und CPU-Leistung umgangen werden.

Hierzu bietet sich die Benutzung von Compute-Clustern an. Auch bei der Verfolgung von Random Walkers treten ähnliche Probleme auf; wir erwarteten, diese auf eine analoge Weise lösen zu können.

Jedoch zeigte sich, dass die Parallelisierung unseres Algorithmus höchst komplex ist. Dies resultiert aus der Notwendigkeit, sehr eng miteinander verflochtene Daten – Generatoren und enthaltene Wahrscheinlichkeiten – zu synchronisieren, die aber auf eine Vielzahl von Compute-Nodes einer Distributed-Memory-Architektur verteilt sind. Dies gelingt im Moment nur durch einen großen Kommunikationsaufwand, der das Speedup-Verhalten verschlechtert.

2.3.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Zur Beschreibung von Spinglas-Aging-Experimenten sind bisher zum einen Clustermodele und zum anderen hierarchisch organisierte Modelle verwendet worden. Gerade die letzteren waren in der Lage, einige der wichtigen Eigenschaften der Experimente zu reproduzieren. Dabei wurden sehr vereinfachte Baummodelle mit einer Mastergleichungsdynamik versehen, die zum Teil sogar eine analytische Lösung zuließen. Zusammen mit einer Modellierung der magnetischen Überlappfunktion, die alle für den Einsatz der Resonanztheorie notwendigen Informationen über die magnetischen Eigenschaften des Systems enthält, konnten so die einfachen Agingexperimente mit ihrem charakteristischen Buckel in der Relaxationsrate angenähert werden.

Unklar ist immer noch, inwieweit die verwendeten Baummodelle die wirkliche Zustandsraumstruktur repräsentieren. Sicher ist, dass einige Eigenschaften der Experimente nicht richtig oder nicht vollständig wiedergegeben werden. Typischerweise steigen z. B. die theoretischen Kurven wieder an, während die experimentellen dies nicht tun. Es ist unbekannt, wie dieser Effekt vermieden werden kann.

Eine interessante Klasse von Experimenten sind solche, bei denen die Temperatur in der Wartezeit verändert wird. Diese so genannten „temperature-cycling“ Arbeiten zeigen verschiedene Verhaltensweisen, für die unklar ist, ob sie im Rahmen der hierarchischen Baummodelle modelliert werden können.

Ziel unserer Untersuchungen war daher, mit dem von uns entwickelten und oben erwähnten NB-Clustering Aging-Experimente zu modellieren. Wir haben dazu aus dem Realraumhamiltonian ein Zustandsraummodell abgeleitet und auf dieser Basis einige der an den heuristischen Baumstrukturen durchgeführten Modellierungen wiederholt [SH04]. Dabei konnten wir durch den direkten Zusammenhang zwischen der untersuchten vergrößerten Zustandsraumstruktur und dem zugrundeliegenden Realraumhamiltonian eines Ising-Spinglases die grundsätzliche Richtigkeit der hierarchischen Baummodelle zeigen, es bieten sich aber auch Ansatzpunkte für eine Reihe von Fortentwicklungen. Diese Arbeiten sind wichtiger Bestandteil der noch erforderlichen Vorarbeiten für die Modellierung der verbliebenen, noch nicht behandelten ac-Suszeptibilitätsexperimente.

Literaturverzeichnis zu 2.3

- [DWB90] H. L. Davis, D. J. Wales, and R. S. Berry. Exploring potential energy surfaces with transition-state calculation. *J. Chem. Phys.*, 92(7):4308–4319, 1990.
- [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):7097–7100, 1988.
- [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):278–294, 1992.
- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- [HS02] K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [HSS97] K. H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani. Age reinitialization in hierarchical relaxation models for spin-glass dynamics. *Europhys. Lett.*, 38(8):613–618, 1997.
- [JVH⁺98] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J. P. Bouchaud, and P. Nordblad. Memory and chaos effects in spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3243–3246, 1998.
- [JYN02] P. E. Jönsson, H. Yoshino, and P. Nordblad. Symmetrical temperature-chaos effect with positive and negative temperature shifts in a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 89(9):097201/1–097201/4, 2002.
- [KBHB98] R. E. Kunz, P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, and S. Berry. Atomic clusters and nanoscale particles: From coarse-grained dynamics to optimized annealing schedules. *J. Chem. Phys.*, 108(6):2576–2582, 1998.
- [LHOV94] F. Lefloch, J. Hammann, M. Ocio, and E. Vincent. Spin glasses in a magnetic field: phase diagram and dynamics. *Physica B*, 203:63–74, 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):911–914, 1983.
- [MJN⁺02] R. Mathieu, P. E. Jönsson, P. Nordblad, H. Aruga Katori, and A. Ito. Memory and chaos in an Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 65(1):012411/1–012411/4, 2002.
- [Pal82] R. G. Palmer. Broken ergodicity. *Adv. Phys.*, 31(6):669–735, 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):268–273, 1987.

- [SH04] S. Schubert and K. H. Hoffmann. Aging in enumerated spin glass state spaces. accepted for publication in *Europhysics Letters*, 2004.
- [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.
- [VHO⁺97] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.-P. Bouchaud, and L. F. Cugliandolo. Slow dynamics and aging in spin glasses. In Miguel Rubíand Conrado Pérez-Vicente, editors, *Lecture Notes in Physics: Complex Behaviour in of Glassy Systems*, volume 492, pages 184–219. Springer, 1997.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation diskreter Systeme

Für die Untersuchung der Zustandsraumstruktur von Ising-Spingsgläsern mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung verwendeten wir im Wesentlichen zwei Algorithmen. Erstens wurden in der Umgebung lokaler Minima der Energie die Zustände katalogisiert; dazu implementierten wir einen auf einem umgekehrten Sintflut-Verfahren basierenden parallelen Algorithmus. Damit wurde die lokale Zustandsdichte bestimmbar: wir konnten zeigen, dass diese mit der Energie subexponentiell zunimmt.

Zweitens benutzten wir rekursive Branch-and-Bound-Methoden, um alle Zustände unterhalb einer festgelegten oberen Schranke der Energie zu finden. Dabei werden auch die Zustände gefunden, die durch Barrieren getrennt sind, die höher als dieser Maximalwert sind. Im Unterschied zu obigem Algorithmus wird die globale Zustandsdichte ermittelbar. Auf Basis der so gewonnenen Daten konnten wir schon früher zeigen, dass diese unterexponentiell anwächst [KSH98] und bis dahin vertretene anders lautende Meinungen widerlegen [SS94, Sib98].

Die globale Zustandsdichte ist auch berechenbar, wenn die Übergangsmatrix des Systems bei unendlicher Temperatur bekannt oder gut approximiert ist [AHM⁺88]. Sie ergibt sich dann als rechter Eigenvektor zum Eigenwert 1. Auf dieser Basis implementierten wir einen parallelen Algorithmus, der sehr gut skalierbar ist [HH04]. Dieser so genannte parQ-Algorithmus benutzt ein Ensemble von Zufallswanderern, die auf beliebig viele Rechenknoten eines Compute-Clusters verteilt werden können: Abb. 2.1 zeigt das Speedup-Verhalten auf zwei Compute-Clustern mit unterschiedlich vielen Random Walkers.

Mit steigender Schrittzahl liefern diese immer besser genäherte Matrixeinträge. Wir benutzten diesen Algorithmus zunächst, um ferromagnetische Ising-Spinsysteme zu untersuchen. Für diese existiert ein von Beale geschaffenes Mathematica-Programm [Bea96], das für zweidimensionale Ising-Gitter exakte Zustandsdichten berechnet und deshalb zu Vergleichen herangezogen werden kann. Unser Algorithmus ist mindestens so performant wie die besten zurzeit existierenden Konkurrenzalgorithmen (z. B. [WL01]). Hierzu wird in Abb. 2.2 die Auswirkung von verschiedenen Anzahlen von Sweeps für einen 32×32 -Isingferromagneten auf die Güte der berechneten Zustandsdichte vergli-

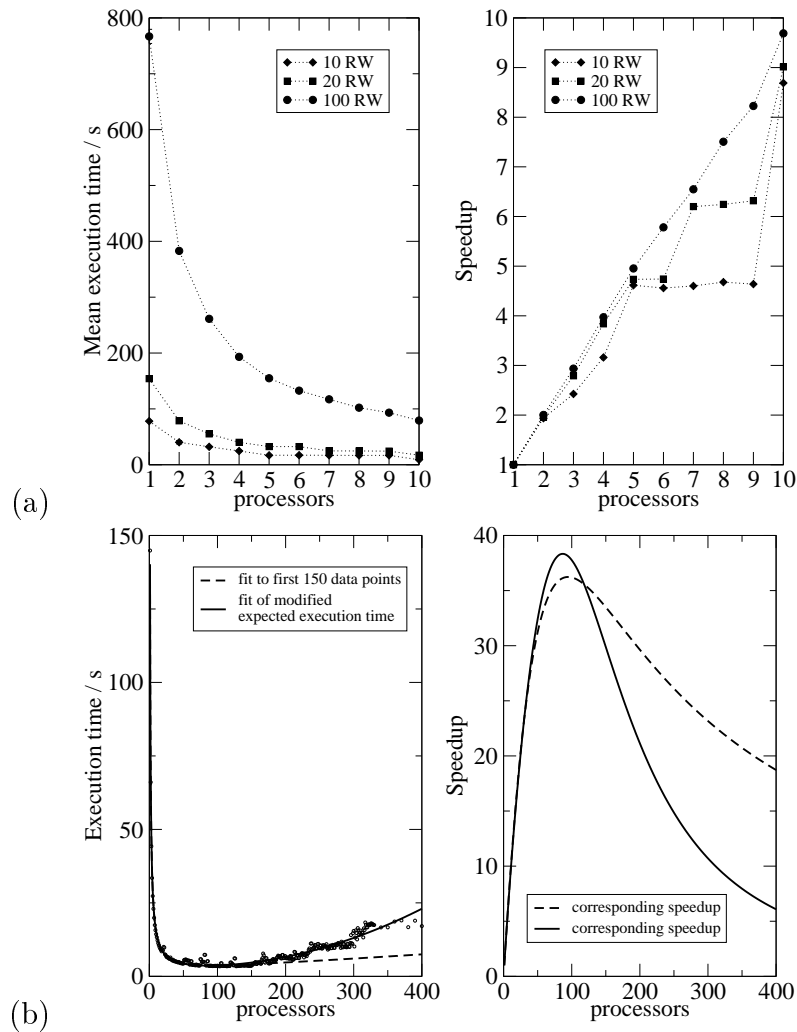


Abbildung 2.1: Laufzeiten und Speedup unseres parQ-Algorithmus auf dem gruppeninternen Cluster (a) und auf dem CLiC (b). Unterschiedliche Zahlen von Random Walkers (RW) führen zu unterschiedlichem Skalierungsverhalten. In Teilabbildung (b) sind zwei verschiedene Fits an die Rohdaten durchgeführt worden.

chen. Mit steigender Anzahl verkleinert sich der relative Fehler in Bezug auf die exakt berechnete Zustandsdichte.

Zur detaillierten Untersuchung energetischer Barrieren und Konnektivitäten entwickelten wir ein Verfahren, welches den Zustandsraum eines Systems vergrößert (Coarse Graining). Dazu werden Zustandsraumbereiche, die leicht miteinander ins Gleichgewicht kommen [Hof99], zu so genannten No-Barrier-Clustern zusammengefasst [SH04b].

Hierzu werden die Zustände eines Spinglas-Edwards-Anderson-Hamiltonian mit Nahbereichswechselwirkung

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i H s_i \quad (2.1)$$

in Reihenfolge aufsteigender Energie betrachtet und entsprechend ihrer Nachbarschaftsrelation zu allen Zuständen geringerer Energie in dynamisch erzeugte Cluster eingeord-

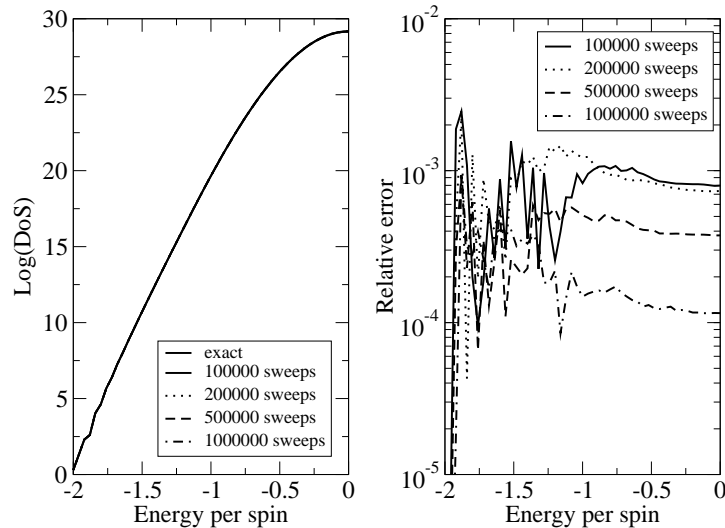


Abbildung 2.2: Zustandsdichteapproximation eines 32×32 -Isingferromagneten und relativer Fehler in Bezug auf die exakte Zustandsdichte in Abhängigkeit der durchgeführten Sweeps.

net. Dabei sind s die Spins und J_{ij} die Wechselwirkungskonstanten zwischen diesen, H ist ein äußeres Magnetfeld, das entsprechend der experimentellen Vorgehensweise gesteuert wird. Die entstehende vergrößerte Struktur, bestehend aus so genannten „local minimum clusters“ und „barrier clusters“, kann durch eine Mastergleichung beschrieben werden, um z. B. Aging-Phänomene nachzubilden. Dazu wurde auch die Dynamik selbst vergrößert, indem effektive kinetische Faktoren aus der mikroskopischen Dynamik abgeleitet wurden, die die Übergangsraten zwischen benachbarten Clustern beschreiben. Dabei ist die mittlere Energie des Clusters als

$$\hat{E}_p = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{1}{\hat{n}_p} \sum_{j \in C_p} e^{-\beta E_j} \right) \quad (2.2)$$

und der effektive kinetische Faktor zwischen den Clustern C_p und C_q als

$$\hat{T}_{pq} = \frac{\sum_{j \in C_q, i \in C_p} t_{ij} \min(e^{-\beta E_j}, e^{-\beta E_i})}{\min(e^{-\beta \hat{E}_p}, e^{-\beta \hat{E}_q})} \quad (2.3)$$

definiert, wobei β die inverse Temperatur, E_i die Energie des Zustandes i , \hat{n}_p die Anzahl der Zustände im Cluster C_p sowie t_{ij} ein kinetischer Faktor ist.

Mit Hilfe dieser Vorgehensweise lassen sich detaillierte Informationen gewinnen und in den vergrößerten Zustandsraum übertragen. Dies ist z. B. die Anzahl der vom globalen Minimum aus erreichbaren lokalen Minima, wenn eine gewisse Barrierenhöhe nicht überschritten werden darf; Abb. 2.3 zeigt eine Mittelung über 88 Spinglasrealisationen der Größe 8×8 .

Ebenfalls wurde die Dichte der entstehenden Cluster untersucht. Diese ist von Bedeutung für die Einschätzung der Güte von z. B. hierarchischen Modellen für Zustandsräume.

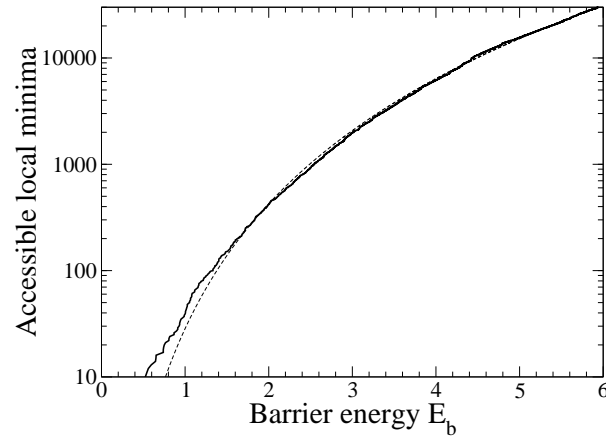


Abbildung 2.3: Lokale Minima, die vom globalen Minimum aus erreichbar sind, ohne eine Barriere größer E_b zu überqueren. Die gestrichelte Linie markiert einen Fit $\sim E_b^{3.9}$.

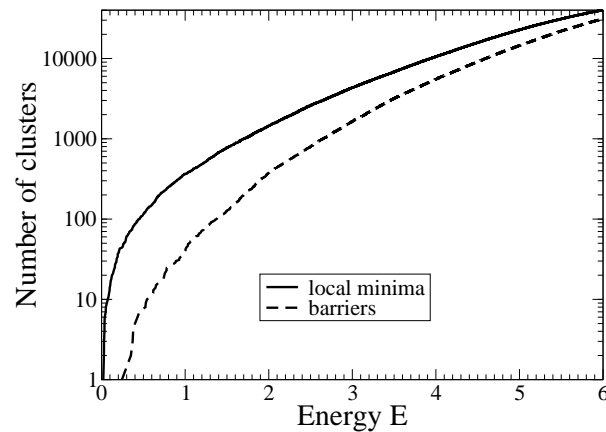


Abbildung 2.4: Anzahl der local minimum clusters und barrier clusters mit Energie kleiner E , die hier relativ zur Energie des globalen Minimums gemessen wurde.

Hierzu wird in Abb. 2.4 die Abhängigkeit der Anzahl der zwei Clusterarten von der Energie dargestellt und ein subexponentieller Anstieg nachgewiesen.

Die oben schon angesprochenen kinetischen Faktoren haben wir gleichfalls sehr detailliert untersucht. Zur Abhängigkeit dieser Faktoren von der Energiedifferenz zweier Cluster zeigt Abb. 2.5 die mittleren kinetischen Faktoren von 131 Spinglasrealisationen. Energetisch kurze Verbindungen sind nachweislich stärker. Die große Standardabweichung wird nicht durch einen breiten Peak um den mittleren Wert verursacht, sondern durch die Verteilung der Verbindungen selbst, s. Abb. 2.6. Diese Ergebnisse bestätigen die bisherigen Arbeiten, insbesondere aber die Richtigkeit einiger Annahmen zu den hierarchischen Modellen. [HS88, SH91, UHS95].

Ein noch detaillierteres Ergebnis zeigt Abb. 2.7: Hier haben wir die Abhängigkeit des mittleren kinetischen Faktors zwischen zwei Clustern gegen die Energiedifferenz aufge-

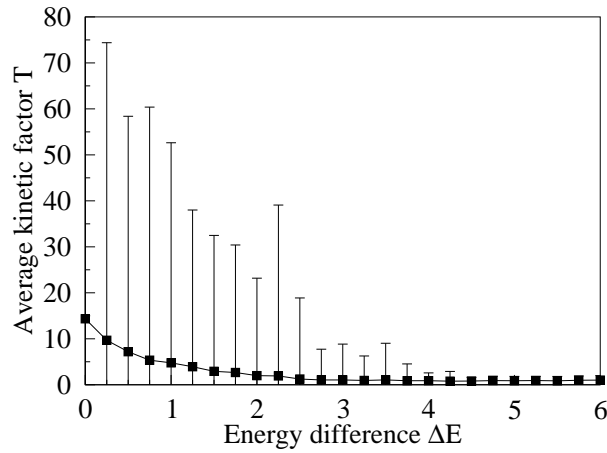


Abbildung 2.5: Mittlere kinetische Faktoren zwischen zwei Clustern als Funktion ihrer Energiedifferenz.

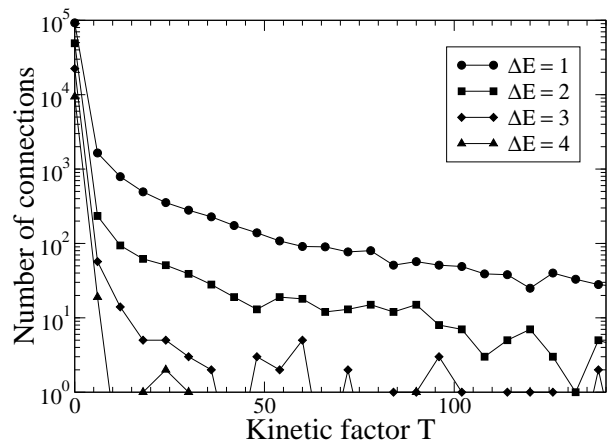


Abbildung 2.6: Anzahl der Verbindungen zwischen zwei Clustern als Funktion des kinetischen Faktors im Energieintervall $(\Delta E, \Delta E + 0.25)$. Die breite Verteilung ist Ursache der großen Standardabweichungen in Abb. 2.5.

tragen, wobei der Cluster mit geringerer Energie zu einem gewissen Energieband gehört. Wir fanden, dass im Mittel die Verbindungen bei kleineren globalen Energien stärker sind als die bei größeren globalen Energien. Dieser Eigenschaft wird bisher in heuristischen Modellen nicht Rechnung getragen, könnte aber eine verbesserte Modellbildung zur Folge haben.

Der Ausgangspunkt bei der Untersuchung des dynamischen Verhaltens kontinuierlicher Systeme war die Grundidee, den kontinuierlichen Zustandsraum auf einen diskreten Raum abzubilden. Diese Aufgabe wurde durch eine bereits im vorhergehenden Bericht grundlegend beschriebene parallele Master-Slave-Implementierung gelöst, bei der systematisch der Zustandsraum durchwandert und an vielen Stellen durch Slave-Prozesse genauer untersucht wird. Diese Implementierung wurde in diesem Berichtszeitraum mehrfach optimiert und zur Anwendungsreife gebracht. Eine entscheidende Bedeutung besitzt in diesem Algorithmus die so genannte Escape-Zeit, die das System bei einer bestimmten

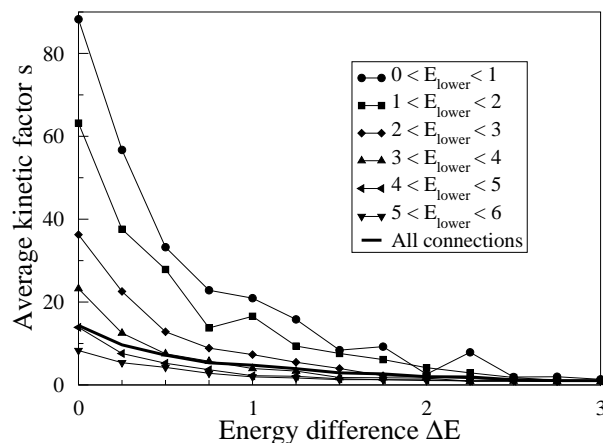


Abbildung 2.7: Mittlerer kinetischer Faktor zwischen zwei Clustern in Abhängigkeit ihrer Energiedifferenz, wobei die Energie des tiefer liegenden Clusters im angegebenen Intervall liegt.

Temperatur im Mittel benötigt, um aus einem lokalen Minimum der potentiellen Energie zu entkommen. Diese Escape-Zeit erlaubt eine Abschätzung der Tiefe eines lokalen Minimums.

Auf diese Weise entsteht eine Statistik von Minima mit bestimmten Eigenschaften, die sich katalogisieren und in Gruppen einordnen lassen. Es gelang, dies für eine in den letzten Jahren besonders interessante Klasse von Systemen, die amorphen Halbleiter, zu realisieren. Es wurde eine optimale Strategie für das Aufsuchen von besonders tief liegenden Minima der potentiellen Energie von Systemen mit gegebener atomarer Zusammensetzung gefunden. Abbildung 2.8 zeigt beispielhaft das Ergebnis für einen Cluster aus amorphem Kohlenstoff, nachdem dessen wesentliche Eigenschaften des Zustandsraumes auf eine durch Barrieren verbundene Struktur von diskreten Zuständen abgebildet werden konnte [BH03]. Die Methode ist ohne weiteres auch auf Systeme aus anderen Atomsorten mit anderen Wechselwirkungspotentialen übertragbar.

2.4.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Um den Einfluss der Konnektivitäten im Zustandsraum eines komplexen Systems auf dessen thermisches Relaxationsverhalten zu verstehen, haben wir unsere Untersuchungen der Diffusion auf Fraktalen fortgesetzt. Wir beschränkten uns auf Sierpinski-Teppiche, da hierfür sowohl ein von uns entwickelter effizienter Algorithmus zur Simulation der Diffusion auf „finitely ramified“ Teppichen existiert [SFSH01], andererseits aber auch komplementäre Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension solcher Strukturen zur Verfügung stehen. Die Teppiche werden in unserem Algorithmus folgendermaßen realisiert: nur der Generator wird, verbunden mit einer hierarchischen Notation der Koordinaten des Walkers, gespeichert. Das entstehende Fraktal wird dabei dynamisch erzeugt und wächst im Verlauf der Simulation. Damit werden im Gegensatz zu herkömmlichen, bitmap-orientierten Algorithmen Randeffekte vermieden und wesentlich genauere Werte für die Random-Walk-Dimension ermittelbar. Als Beispiel zeigt Abb. 2.9 die Entstehung eines „finitely ramified“ Teppichs von Stufe 1 bis 3.

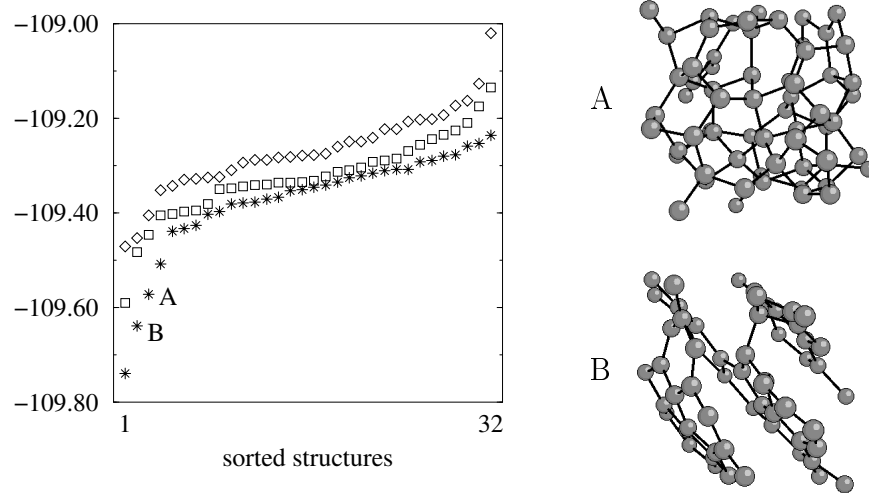


Abbildung 2.8: Links: Statistik der potentiellen Energien tief liegender Minima von jeweils 32 Systemen, neuentwickelte Strategie (Sterne) im Vergleich mit vorher gewonnenen Resultaten (Quadrate). Rechts: Kohlenstoffcluster (A: amorph, B: graphitähnlich bei besonders geringer potentieller Energie)

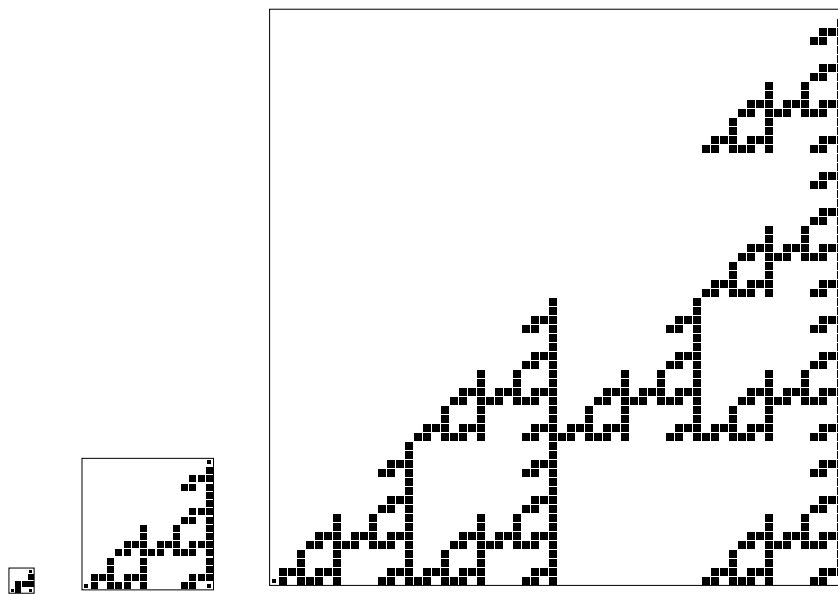


Abbildung 2.9: Entstehung eines typischen Sierpinski-Teppichs. Die kleinen Quadrate markieren die Verbindungen zum Rest der Struktur.

Die Parallelisierung des Algorithmus für Compute-Cluster wurde von uns in der vergangenen Periode in Angriff genommen. Dabei ergaben sich mehrere Herausforderungen. Erstens musste eine effektive, über mehrere Compute-Nodes verteilbare dynamische Datenhaltung implementiert werden. Dazu haben wir die dynamisch generierten Fraktalteile in einer verteilten Liste abgelegt. Zweitens müssen *alle* Compute-Nodes darüber

informiert werden, wo welcher Teil des Teppichs verwaltet wird. Hierzu müssen nach Generierung eines neuen Teils umfangreiche, prozessgruppenweite Kommunikationen stattfinden, um die Daten auf allen Knoten zu synchronisieren. Drittens darf ein neu zu generierender Teil nicht gleichzeitig mehrfach erzeugt werden: dieses Problem tritt z. B. in den Zeitschritten auf, in denen Random Walkers, die in verschiedenen Richtungen um eine Pore des Fraktals herum wanderten, sich wieder treffen.

Beispielhaft zeigt Abb. 2.10, wie die sich ausbreitende Wahrscheinlichkeitsdichte auf einem Fraktal nach und nach die Erzeugung neuer Fraktalteile notwendig macht. Ausgehend vom Zentrum des Fraktals läuft diese breit, jedoch existiert eine Vorzugsrichtung (hier die x -Achse), auf der dies schneller geschehen kann. Daher ist das entstehende (Pseudo)-Fraktal in diese Richtung weiter ausgedehnt.

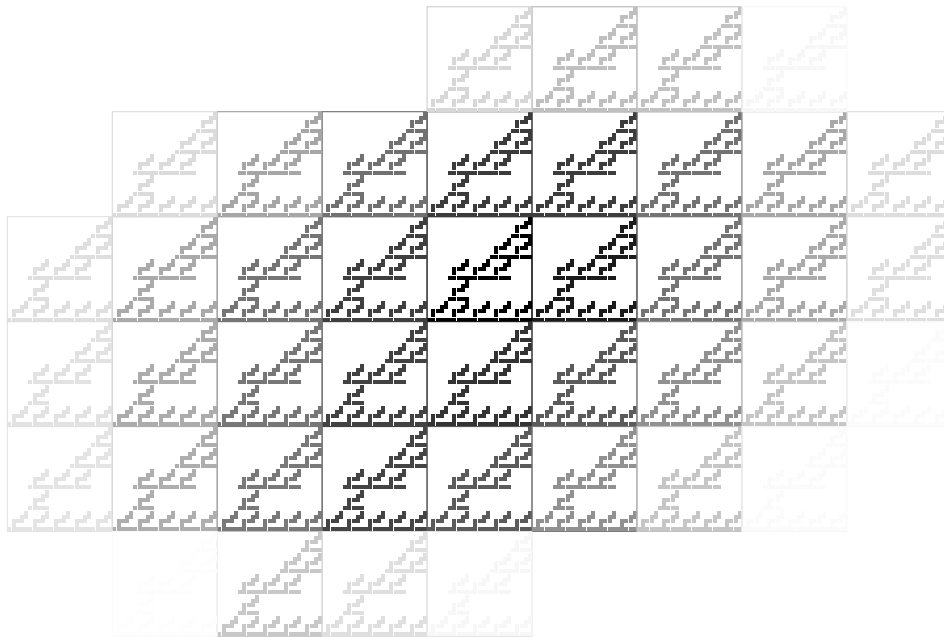


Abbildung 2.10: Durch Breitlaufen einer ursprünglich scharf konzentrierten Wahrscheinlichkeitsdichte entstehendes Fraktal. Je heller der Teil, desto später wurde dieser in die schon bestehende Struktur eingefügt.

Diese Aspekte machten es notwendig, strikt zwischen den Teilen Generation von neuen Teppichteilen, Schrittausführung der Random Walker und Kommunikation zu unterscheiden und ein Ausführungsschema zu entwickeln, welches die Daten synchron hält. Alle drei Teile sind aber sehr eng miteinander verknüpft und bedingen teilweise einander. Der dadurch entstehende große Kommunikationsaufwand bietet uns einen Ansatzpunkt für weitere Verbesserungen. In Zusammenarbeit mit Frank Mietke aus dem neu beantragten TP B10 wurde eine Zeitmessung durchgeführt, die in Abb. 2.11 dargestellt ist. Hier ist der relative Anteil der Kommunikation via MPI an der Gesamtlaufzeit als Funktion des Iterationsschrittes während der Berechnung einer Dichteverteilung auf einem Fraktal dargestellt.

Darüber hinaus wurden von uns ergänzende Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension untersucht, angewandt und weiterentwickelt: Iteration der Mastergleichung und Resistance Scaling. Zur Untersuchung der Diffusion mittels Mastergleichung

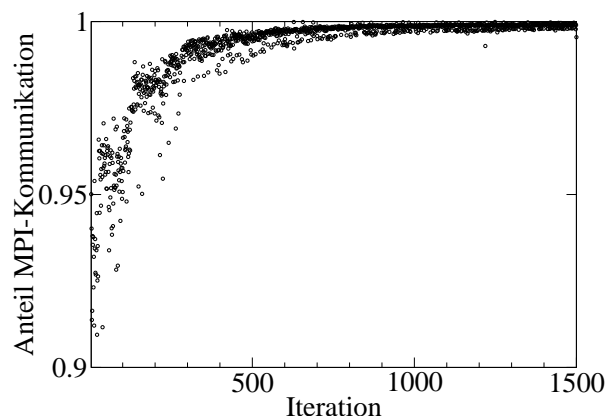


Abbildung 2.11: Relativer Anteil der Kommunikation via MPI an der Gesamtlaufzeit einer Wahrscheinlichkeitsdichteberechnung als Funktion des Iterationschrittes.

entwickelten wir basierend auf der „Exact Enumeration Method“ [HBA87] einen Algorithmus, der die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem untersuchten Fraktal dynamisch speichert [FSSH00]. Auch hier verfolgten wir das Ziel, diesen zu parallelisieren und eine für Compute-Cluster optimal angepasste Implementation zu finden, um Speicherplatzbeschränkungen zu umgehen. Unsere Idee war, nur die besuchten Teile des Fraktals zu speichern. Hier treten im Prinzip die gleichen Probleme auf wie auch schon bei der oben beschriebenen Parallelimplementation der Random-Walk-Variante. Es kommt aber noch hinzu, dass CPU-Last und Kommunikationsaufwand mit der Laufzeit steigen können. Die Konnektivität zwischen den Teilen des Fraktals muss deshalb besonders sorgfältig mit der Inter-Node-Kommunikation verknüpft werden, um ausreichende Effizienz zu gewährleisten. Außerdem muss eine leistungsfähige Lastverteilung kreiert werden. Zur Zeit gibt es eine erste Implementation.

Analytische Untersuchungen starteten mit der Einsicht, dass die Brownsche Bewegung auf einem Substrat und der Stromfluss durch ein entsprechendes Widerstandsnetzwerk eng gekoppelt sind [FSH01]. Skalierungsuntersuchungen des Gesamtwiderstands erlauben Berechnungen der Random-Walk-Dimension mit beliebiger Genauigkeit. Dies wurde mit einem entsprechenden Mathematica-Programm umgesetzt [SFH00] und für die Berechnung chemischer Dimensionen erweitert [FSH02]. Diese drei Methoden – Verfolgung von Random Walkers, Iteration der Mastergleichung, Widerstandsskalierung – wurden gegenübergestellt in einer Zusammenfassung [FSSH02].

Die Möglichkeit einer Kontinuumsbeschreibung der Diffusion auf Fraktalen wurde auch in der vergangenen Antragsperiode weiter untersucht. Neben einer Reihe von schon existierenden Arbeiten [HES98, ESFH00, SED⁺00, DES⁺01, EDS⁺01], jedoch ist diese Frage im Wesentlichen ungeklärt und weiterhin Gegenstand intensiver Forschung.

2.4.3 Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Nachdem in der Vergangenheit hierarchische Baummodelle verwendet wurden, um Alterungseffekte bei Spingläsern zu erklären, haben wir einen ersten Versuch unternommen, um eine Modellierung zu finden, die direkt auf dem Realraumhamiltonian eines Ising-

Spinglases aufbaut [SH04a]. Ausgehend von den Daten des enumerierten Zustandsraumes führten wir eine Vergrößerung des Zustandsraumes durch, bei der auch die magnetischen Eigenschaften berücksichtigt wurden. Das von uns entwickelte NB-Clustering-Verfahren lieferte dann einen mesoskopischen Zustandsraum, auf dem mittels Mastergleichungsdynamik das zeitliche Verhalten mit und ohne Magnetfeld modelliert werden konnte. Im Einzelnen konnten so Simulationen durchgeführt werden, die den Aging-Experimenten entsprechen.

Eine der damit untersuchten experimentellen Situationen ist das ZFC-Experiment. Dabei wird das System ohne äußeres Magnetfeld abgekühlt und kann anschließend für eine Zeit t_w relaxieren. Danach wird ein kleines, konstantes Magnetfeld eingeschaltet und die zeitliche Entwicklung der Magnetisierung gemessen. Dabei betrachten wir zur besseren Übersicht die Ableitung der Magnetisierung nach dem Logarithmus der Zeit, als Relaxationsrate bezeichnet, $S(t) = dM(t)/d \log(t)$, wobei $t = 0$ der Zeitpunkt der Einschaltens des Magnetfeldes ist. Aus Abb. 2.12 geht dabei klar hervor, dass jeweils $S_{\max} \equiv S(t \approx t_w)$ gilt. Das wiederum bedeutet, dass man aus dem Zeitverlauf der Relaxationsrate das Alter des untersuchten Systems ableiten kann.

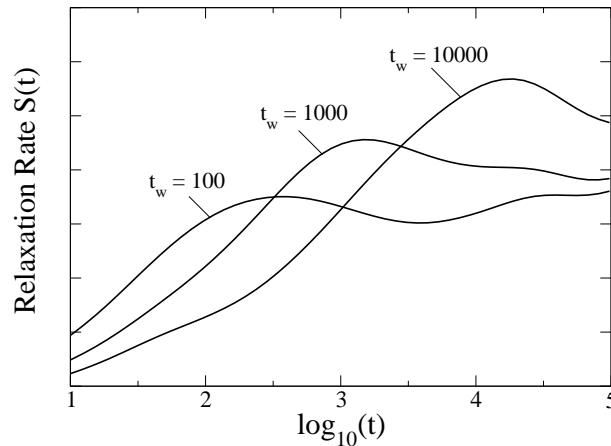


Abbildung 2.12: Relaxationsrate $S(t) = dM(t)/d \log(t)$, gemittelt über 500 Realisierungen des vergrößerten Spinglases. Das System wird abgekühlt, und nach Verstreichen der Wartezeit t_w legt man ein konstantes schwaches Magnetfeld an und misst den Zeitverlauf der Magnetisierung. Dabei findet man, dass die Zeitpunkte der Maxima der Relaxationsrate genau wie im Experiment mit den Wartezeiten korrespondieren.

Eine Modifikation dieses Experimentes ist das ZFC-Experiment mit Temperaturstufe. Der prinzipielle Ablauf dieses Experimentes ist gleich dem obigen mit dem kleinen aber wesentlichen Unterschied, dass die Temperatur während der Wartezeit t_w um ΔT niedriger als zur Messzeit t ist. Der Effekt der Temperaturstufe ist, dass die Ergebniskurven mit niedrigerer Temperatur während der Wartezeit jünger erscheinen, d. h. das Maximum der Relaxationsrate ist nach links verschoben, wie Abbildung 2.13 deutlich zeigt. Technisch gesehen ist die scheinbare Wartezeit oder das scheinbare Alter eines Systems durch die Position des Maximum der Relaxationsrate definiert. Stellt man, wie in Abbildung 2.14, die scheinbare Wartezeit als Funktion der Temperaturstufe ΔT dar, findet man eine exponentielle Abhängigkeit, wobei der Betrag des Koeffizienten mit steigender

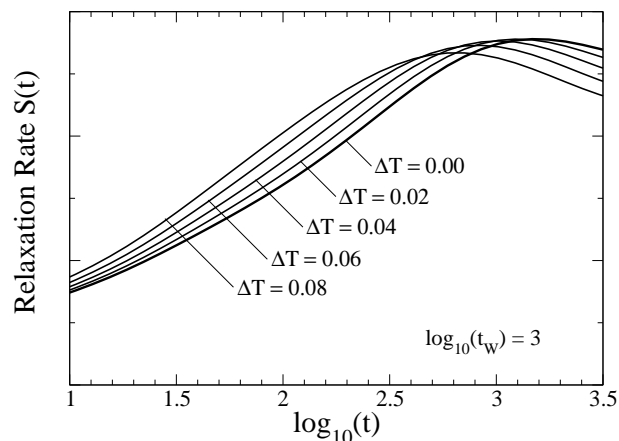


Abbildung 2.13: Relaxationsrate $S(t) = dM(t)/d \log(t)$ des ZFC-Experimentes mit Temperaturstufe unter dem Einfluss unterschiedlicher Temperaturabsenkung ΔT während konstanter Wartezeit $t_w = 1000$. Dabei finden wir, dass die Zeitpunkte der Maxima der Relaxationsrate mit steigendem ΔT nach links verschoben werden, ein Effekt den man auch als geringeres scheinbares Alter verstehen kann.

Wartezeit zunimmt.

Dabei zeigen sich für große ΔT , insbesondere bei langen Wartezeiten, Abweichungen vom exponentiellen Verhalten. Diese resultieren aus den Übergangsraten, welche für die Dynamik während der Wartezeit benutzt werden. Wie aus den Gleichungen (2.2) und (2.3) hervorgeht, ist die Vergrößerung der Dynamik temperaturabhängig; aus Gründen der Durchführbarkeit wurden aber die gleichen Parameter sowohl während der Wartezeit als auch während der Messzeit verwendet. Für kleine ΔT ist diese Vereinfachung aber möglich, und wir finden eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Befunden [GSN⁺88].

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Publikationen:

- [AHM⁺88] B. Andresen, K. H. Hoffmann, K. Mosegaard, J. Nulton, J. M. Pedersen, and P. Salamon. On lumped models for thermodynamic properties of simulated annealing problems. *J. Phys. France*, 49:1485–1492, 1988.
- [BH03] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Ground states for condensed amorphous systems: Optimizing annealing schemes. *Comp. Phys. Comm.*, 150(3):293–299, 2003.
- [DES⁺01] 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. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(20):L289–L296, 2001.
- [EDS⁺01] C. Essex, M. Davison, C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. The differential equation describing random walks on the Koch curve. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(41):8397–8406, 2001.

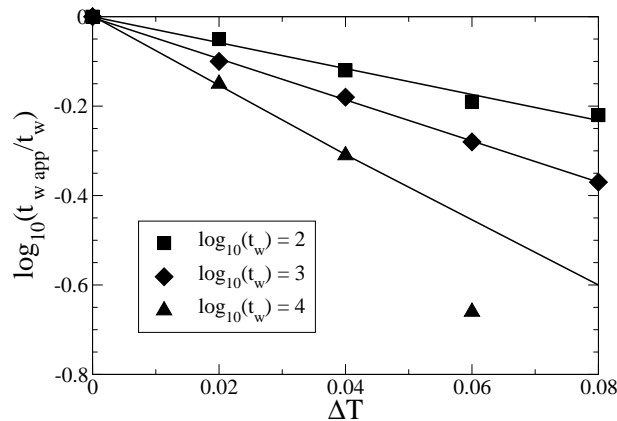


Abbildung 2.14: Logarithmus der scheinbaren Wartezeit t_w^{app} als Funktion der Temperaturstufe ΔT für verschiedene Wartezeiten T_w . Die scheinbare Wartezeit ist durch das Maximum der Relaxationsrate definiert, welches in Experimenten mit Temperaturstufe zu kürzeren Zeiten hin verschoben ist. Die Linien repräsentieren lineare Trends; im Falle von $t_w = 10000$ wurden dabei aus im Text genannten Gründen nur Werte $\Delta T \leq 0.04$ berücksichtigt.

- [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):299–308, 2000.
- [FH02] A. Franz and K. H. Hoffmann. Optimal annealing schedules for a modified Tsallis statistics. *J. Comput. Phys.*, 176(1):196–204, 2002.
- [FH03] A. Franz and K. H. Hoffmann. Threshold accepting as limit case for a modified Tsallis statistics. *Appl. Math. Lett.*, 16(1):27–31, 2003.
- [FHS01] A. Franz, K. H. Hoffmann, and P. Salamon. Best possible strategy for finding ground states. *Phys. Rev. Lett.*, 86(23):5219–5222, 2001.
- [FSH01] A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets. *Nonlinearity*, 14(5):1411–1418, 2001.
- [FSH02] A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Using computer algebra methods to determine the chemical dimension of finitely ramified Sierpinski carpets. *SIGSAM Bulletin*, 36(2):18–30, 2002.
- [FSSH00] 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):155–161, 2000.
- [FSSH02] A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger, and K. H. Hoffmann. Diffusion on fractals – efficient algorithms to compute the random walk dimension. In J. M. Blackledge, A. K. Evans, and M. J. Turner, editors, *Fractal Geometry: Mathematical Methods, Algorithms, Applications*, IMA Conference Proceedings, pages 52–67. Horwood Publishing Ltd., Chichester, West Sussex, 2002.
- [FSTH01] A. Franz, C. Schulzky, S. Tarafdar, and K. H. Hoffmann. The pore structure of Sierpinski carpets. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(42):8751–8765, 2001.

- [HES98] K. H. Hoffmann, C. Essex, and C. Schulzky. Fractional diffusion and entropy production. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 23(2):166–175, 1998.
- [HFS02] K. H. Hoffmann, A. Franz, and P. Salamon. Structure of best possible strategies for finding ground states. *Phys. Rev. E*, 66:046706, 2002.
- [HH04] F. Heilmann and K. H. Hoffmann. The parQ method: a parallelized algorithm for calculating the density of states. submitted to Parallel Computing, March 2004.
- [HHS04] F. Heilmann, K. H. Hoffmann, and P. Salamon. Best possible probability distribution over extremal optimization ranks. *Europhys. Lett.*, 66(3):305–310, 2004.
- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- [HS88] K. H. Hoffmann and P. Sibani. Diffusion in hierarchies. *Phys. Rev. A*, 38(8):4261–4270, 1988.
- [HS02] K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [HS03] K. H. Hoffmann and J. C. Schön. Kinetic features of preferential trapping on energy landscapes. submitted to Europhysics Letters, December 2003.
- [KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. The state space of short-range Ising spin glasses: the density of states. *Eur. Phys. J. B*, 2(3):313–317, 1998.
- [LED⁺03] X. Li, C. Essex, M. Davison, K. H. Hoffmann, and C. Schulzky. Fractional diffusion, irreversibility and entropy. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 28(3):279–291, 2003.
- [SED⁺00] C. 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):5501–5511, 2000.
- [SFH00] C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified Sierpinski carpets. *SIGSAM Bulletin*, 34(3):1–8, 2000.
- [SFSH01] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets. *Comp. Phys. Comm.*, 134(3):307–316, 2001.
- [SH91] P. Sibani and K. H. Hoffmann. Relaxation in complex systems: Local minima and their exponents. *Europhys. Lett.*, 16:423, 1991.
- [SH02] S. Seeger and K. H. Hoffmann. The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 14(2):321–335, 2002.
- [SH04a] S. Schubert and K. H. Hoffmann. Aging in enumerated spin glass state spaces. accepted for publication in Europhysics Letters, 2004.
- [SH04b] S. Schubert and K. H. Hoffmann. The structure of enumerated spin glass state spaces. accepted by Computer Physics Communications, 2004.

- [TFSH01] S. Tarafdar, A. Franz, S. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Modelling porous structures by repeated Sierpinski carpets. *Physica A*, 292(1-4):1–8, 2001.
- [UHS95] C. Uhlig, K. H. Hoffmann, and P. Sibani. Relaxation in self similar hierarchies. *Z. Phys. B*, 96:409–416, 1995.

Andere Zitate:

- [Bea96] P. D. Beale. Exact Distribution of Energies in the two-dimensional Ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 76(1):78–81, 1996.
- [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):7097–7100, 1988.
- [HBA87] S. Havlin and D. Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695–798, 1987.
- [Sib98] P. Sibani. Local state space geometry and thermal relaxation in complex landscapes: the spin-glass case. *Physica A*, 258(3–4):249–262, 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):6667–6671, 1994.
- [WL01] F. Wang and D. P. Landau. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10):2050–2053, 2001.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die Arbeiten in diesem Teilprojekt dauern an; sowohl bezüglich der Zustandsraumauflösung als auch der Spinglasmodellierung gibt es weiterhin eine Reihe offener Fragen:

- Kann eine Methode implementiert werden, die wahlweise mehr oder weniger detailliert den Zustandsraum eines Spinglases vergrößert? Wie muss die innere Struktur sehr großer Cluster beschaffen sein, damit dies möglich wird?
- Wie könnte eine solche Methode effektiv parallelisiert werden? Hierzu könnten sich Schemata anbieten, die eine Gebietszerlegung im Zustandsraum benutzen, um benachbarte Zustände zusammenzufassen.
- Ist es möglich, den Zustandsraum von Spingläsern in der Umgebung lokaler Minima soweit zu enumerieren, dass eine größere Anzahl von Spinflips erforderlich ist, um diesen Bereich zu verlassen?
- Wie kann das unterexponentielle Wachstum der Zustandsdichte am besten charakterisiert werden?

Auch zu den Forschungen auf dem Gebiet der Fraktale ergeben sich eine Reihe von interessanten Fragestellungen:

- Wie wirkt sich die Mischung von unterschiedlichen Fraktalgeneratoren gleicher Random-Walk-Dimension auf die Dimension des erzeugten Zufallsfraktales aus?

- Was geschieht, wenn nunmehr Generatoren verschiedener Dimension verwendet werden?
- Auch eine Energiefunktion kann auf Fraktalen definiert sein. Dann existieren Vorzugsrichtungen für Zufallswanderer auf diesen. Wie ist dann das Wechselspiel zwischen Random-Walk-Dimension und Energiefunktion zu charakterisieren?

Im Bereich der Modellierung von Spinglasexperimenten verbleiben z. B. folgende Probleme:

- Kann man mit Hilfe der linearen Response-Theorie die ac-Suszeptibilität der hierarchischen Modelle für die neueren Experimente mit Temperaturrampe bestimmen, und darauf aufbauend die experimentell beobachteten Effekte reproduzieren?
- Lässt sich hierzu, basierend auf den Kenntnissen über die Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte der Übergangsmatrix, der Propagator für eine kontinuierliche Temperaturrampe ermitteln?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Projekte ist im Finanzierungsantrag 2005–2007, Teilprojekt C3, enthalten.